分析化学手册

FENXIHUAXUESHOUCE

第五分册

气相色谱分析

第二版

化学工业出版社

分析化学手册

（第二版）

第五分册

气相色谱分析

李浩春　主编

化学工业出版社
·北　京·

（京）新登字 039 号

图书在版编目（CIP）数据

分析化学手册　第五分册：气相色谱分析/李浩春主编．
—2 版．－北京：化学工业出版社，1999
ISBN 7-5025-2319-7

Ⅰ．分…　Ⅱ．李…　Ⅲ．①分析化学-手册②气相色谱-化
学分析　Ⅳ．065-62

中国版本图书馆 CIP 数据核字（98）第 26106 号

分 析 化 学 手 册

（第二版）

第 五 分 册

气相色谱分析

李浩春　主编

责任编辑：任惠敏　田　桦

责任校对：凌亚男

封面设计：于　兵

化学工业出版社出版发行

（北京市朝阳区惠新里 3 号　邮政编码 100029）

新华书店北京发行所经销

北京市燕山印刷厂印刷

三河市前程装订厂装订

开本 787×1092 毫米 1/16　印张 77¾　字数 1931 千字

1999 年 3 月第 2 版　　1999 年 3 月北京第 1 次印刷

印　数：1—4000

ISBN 7-5025-2319-7/TQ・1096

定　价：128.00 元

《分析化学手册（第二版）》编辑委员会

程介克　武汉大学
陈洪渊　南京大学
于德泉　中国医学科学院药物研究所
张玉奎　中国科学院大连化学物理研究所
张孙玮　杭州大学
刘振海　中国科学院长春应用化学研究所
丛浦珠　中国医学科学院药物研究所
彭图治　杭州大学
杨峻山　中国医学科学院药用植物研究所
柯以侃　北京化工大学
王国顺　杭州大学
任惠敏　化学工业出版社

第二版前言

分析化学是人们获得物质化学组成和结构信息的科学。由于多学科的交叉渗透，现代分析化学已发展成为一个庞大的学科体系，建立起了比较成熟的多种分析方法，包括色谱分析、电化学分析、光谱分析、波谱分析、质谱分析、化学分析、热分析、放射分析、生化分析等。它一方面在科学研究中起着至关重要的作用，极大地推动着其他学科的发展；另一方面还直接服务于国民经济和生产建设的需要。同时，当代科学技术和人类生产活动的飞速发展也向分析化学学科提出了严峻的挑战，并带来了前所未有的发展机会。

我国的分析化学学科在新中国建立以来，特别是改革开放以后，取得了长足的发展。到目前为止，在全国范围内已形成了一支以中国科学院和高等院校及各部委研究所为核心的分析化学科研队伍，和一个涉及生物、环境、材料、临床、医药、地质、冶金、石化、宇航、商检、法医、侦破和考古等领域的庞大分析检验队伍，共同构成了我国分析化学学科研究发展的源泉和推广应用的基地。在多年的发展过程中，无论是分析化学的基础理论，还是实际应用方面，都已形成了丰富的知识和经验的积累，需要进一步的总结和推广。

《分析化学手册》是一部比较全面的反映现代分析技术，供化学工作者使用的专业工具套书。手册第一版自1979年出版以来，在读者中形成了一定的影响，已成为许多分析化验室的必备图书。但由于受组稿时的历史条件所限，加上近20年来是世界和我国的科学技术，包括分析化学学科飞速发展的时期，原手册第一版在内容和编排上已不能全面反映当前我国分析化学的发展现状。因此，根据广大读者的要求，我们组织了这套《分析化学手册》的修订工作。

在第一版原有6个分册的基础上，这次经扩充和修订为以下10个分册：

第一分册　基础知识与安全知识

第二分册　化学分析

第三分册　光谱分析

第四分册　电分析化学

第五分册　气相色谱分析

第六分册　液相色谱分析

第七分册　核磁共振波谱分析

第八分册　热分析

第九分册　质谱分析

第十分册　化学计量学

其中第一分册为基础内容，收集了分析工作中常用的基础数据、分析实验室

的安全知识及分析数据的常规处理、计算机应用的基础知识。第十分册所涉及的化学计量学是近些年来发展非常迅速的化学学科的一个分支，与分析化学有着特殊密切的关系，它应用数学和统计学的方法，并引入计算机科学的发展成果，其研究对象几乎涉及分析化学的所有过程，对于设计或选择最优的分析方法，解析大量的化学分析数据以最大限度地获取化学信息等具有普遍的指导意义，因此修订时增加这一部分内容。其他各分册均是按分析方法及所采用的主要仪器类型来划分，大体包括两方面的内容：基础原理、基础数据部分和实际应用部分。

本次修订，在内容上我们着重收录了基础性的理论和发展较为成熟的方法及应用，注意推陈出新，更新有关数据，增补各自领域近些年的新发展新成果．特别是计算机应用、多种分析手段联用技术的发展，以及分析技术应用于生命科学等的内容。

在编排方式上，进一步突出了手册的可查性。各册均编排主题词索引，与目录相互补充。手册中所涉及的名词术语统一采用国家自然科学名词审定委员会发布的标准，计量单位参照国家标准《GB 3100～3102—93・量和单位》的有关规定贯彻执行。其他凡有国家标准的也一律采用相关最新标准。

第二版的重编修订工作得到了我国分析化学界的大力支持，包括11位中国科学院院士在内的近30位知名专家、学者应邀担任了手册修订的编委会成员，全套书的修订出版凝聚着他们大量的心血和期望，在此谨向他们，以及在编写过程中曾给予我们热情支持与帮助的有关院校、科研单位及厂矿企业的专家和同行们，致以衷心的感谢。同时我们也真诚地期待着广大读者的热情关注和批评指正。

《分析化学手册》编委会

1996年6月

本分册修订说明

在第一版《分析化学手册》中，"气相色谱"是作为第四分册的上册出现的。本次修订重版调整为一个独立的分册——第五分册。

气相色谱是分离和分析复杂化合物的有力工具。在第一版《手册》出版至今的十几年中，无论是气相色谱的高效分离检测技术，还是仪器设备，均有了飞速的发展。计算机的应用，智能气相色谱的出现，气相色谱与质谱、光谱等联用技术的发展，以及多维色谱的出现，使得气相色谱不仅是分离分析易挥发化合物的有力手段，同时在分离分析复杂、难挥发及不稳定样品方面也有了进一步广泛的应用。因此，气相色谱在诸多分析方法中就更加显得重要了。

《分析化学手册》第一版的"色谱分册"由成都科学技术大学分析化学教研室编写。本次由中国科学院大连化学物理研究所李浩春研究员任主编，修振佳、叶芬、许国旺、洪群发、罗春荣、李全洪、杨黎、程悦生等分别承担书中不同章节的编写工作，全书由主编汇总定稿。

本分册由三部分（三篇）内容构成。第一篇是气相色谱的原理与技术，包括气相色谱法基本概念，气相色谱重要术语与符号，通用固定液汇编，常用计算机程序集等。

第二篇聚集了用于气相色谱分析定性的保留指数和色谱定量的校正因子数据。由于精确定量分析时，应该使用与样品分析相同的色谱分析条件下，用纯样测定出组分的定量校正因子，并将测定值用于定量计算，因此本书中汇编的校正因子数据较少，以免占篇幅。而书中尽量多收集了各种物质的保留指数的实验值。这些化合物保留指数数据可作为基础数据直接用于色谱峰的定性及色谱理论与物理化学理论研究工作中有关的计算。依据实用的原则，我们摒弃了早期少量不准确的碳氢化合物与含氧化合物保留指数的实验值，未收入化合物保留指数的计算值及各种保留时间、保留体积、相对保留值等定性数据。汇编时按表中化合物的类别或产品类别安排；若原资料有不同类别化合物时，则视情况编入最便于查找的那一类中。

第三篇编入了千余幅气相色谱图，供读者在进行气相色谱分析工作时借鉴。从浩如烟海的色谱图中取舍收集的谱图时，我们以符合我国读者实用作为录选的根本原则，故特别注意收入有典型意义的色谱图、用标准方法所得的色谱图和色谱分析结果优秀的色谱图。对于组分大致相同和分析结果水平相近的色谱图，为了对先行者工作的尊重，只选择其中先发表的资料，不避其发表的年代较早。分类编排这些色谱图时，是以其主要组分的类别或样品来源为依据，如组分为农药的谱图，大部分按组分类别编排在农药类，少部分按样品类别编排在食品污染、环境污染类中。

书末编辑的各种索引，可使读者方便、迅速地查到本书中感兴趣的资料；寻找可借鉴的色谱图，考察合宜固定液性质的异同，比较各组分保留指数的差异，选择可用的计算机程序，确定需用的术语和符号。

在编写此书时，努力做到不求最全，但求最佳；收集了至 1997 年众多国内外出版的气相色谱书籍、杂志、会议论文集和一些色谱厂家发行的资料，引用了其中重要的资料；力求内容系统、材料实用、图表有代表性、便于查找，以满足各层次色谱工作者的需要。

衷心感谢周同惠院士对初稿进行审阅，作了斧正；感谢任惠敏编辑提出许多宝贵意见，和改正了不符合我国新的有机物质命名原则的有机化合物中文命名；感谢张庆玺教授将书中表

18-35 的药物英文名称译成中文。

在本书编写过程中得到了我国著名分析化学专家本《手册》编委会委员：陆婉珍、卢佩章、陈耀祖、王敬尊、张玉奎等以及色谱分析专家孙加和、顾侃英等的热情关注与支持，在此一并表示感谢。同时还要感谢李浩春研究员的夫人胡金英女士，这位血液透析者对主编工作的支持，对于完成此书稿起了重要作用。

由于时间仓促，加之要求很高，书中谬误和不当之处在所难免，切望读者批评指正。

编者

1998 年秋

目　　录

第一篇　气相色谱方法

第二篇 定性、定量用数据选集

第三篇　谱图选集

表 目 录

第一篇　气相色谱方法

第一章　概　　论

第一节　色谱法历史

我们生活中遇到的物质，多数是混合物。若欲知其中各组分为何种物质及其含量多少，通常有两种方法：一种是先将各组分分离开，然后对已分离的组分进行测定；另一种是不需将组分分离开，直接对感兴趣的组分进行测定。色谱法是属于前者的分离、分析方法，其原理可比喻为一群运动员在一条泥泞的道路顺风赛跑，他们同时起跑后，因本身体力差异及道路、风力的影响，相互的距离逐渐增大，最后于不同的时间达终点。若把运动员视为欲分离的组分，泥泞的道路与顺风各为固定相与流动相，道路为色谱柱，那么可以将色谱法分离、分析的原理写成：利用组分在体系中固定相与流动相的分配有差异，当组分在两相中反复多次进行分配并随流动相向前移动，各组分沿色谱柱运动的速度就不同，分配系数小的组分较快地先从色谱柱流出。我们还可进一步写出色谱法的定义：依此原理将混合物组分进行分离和测定的方法，称为色谱法。

据考证，古罗马人曾利用此原理的技术分析过染料与色素[1]。1850 年德国染料化学家 F F Runge 撰写的《染料化学》（“Farbenchemie”）中，所叙述的检查染料成分的方法，就与现在的纸色谱法类似[2]。现在人们把俄国植物学家 Михаил Семенович Цвет（1872～1919 年）奉为色谱法的创始人，因为他 1901 年起研究用色谱法分离、提纯植物色素。他在 1903 年 3 月 21 日于华沙自然科学学会生物学会会议上，提出题目为“一种新型吸附现象及其在生化分析上的应用”论文，叙述了应用吸附剂分离植物色素的新方法[3]。他将叶绿体色素的石油醚抽提液倾入装有碳酸钙吸附剂的玻璃柱管上端，继之倾入纯石油醚进行淋洗，结果不同色素按吸附顺序在管内形成相应的彩色环带，就像光谱一样。他在 1906 年发表的另一文中，命名这些色带为色谱图，称此方法为色谱法；在 1907 年于德国生物学会会议上，展示过有色带的柱管和提纯的植物色素溶液[4,5]。

现在色谱法已发展成有许多分支的方法。按照体系中流动相与固定相聚集态进行分类是色谱法典型的分类方法，如表 1-1 所示。

表 1-1　典型的色谱法分类

流动相	色谱法分类	固定相	色谱法名称
气体	气相色谱法（GC）	固体	气固色谱法（GSC）
		液体	气液色谱法（GLC）
液体	液相色谱法（LC）	固体	液固色谱法（LSC）
		液体	液液色谱法（LLC）

为了便于从某一事实观察和考虑问题，也可将色谱法按其他标准分类，如：按固定相的形态分类，有柱色谱法、纸色谱法、薄层色谱法等；按分离的机理分类，有吸附色谱法、分

配色谱法、离子交换色谱法、排阻色谱法、电泳等；按色谱展开操作方式分类，有洗脱法、顶替法、迎头法等；按色谱柱形状分类，有填充柱色谱法、毛细管柱色谱法等；按技术特点分类，有制备色谱法、裂解色谱法、顶空色谱法等，不胜枚举。

现在可将 Цвет 提出的色谱方法列入液固色谱法、吸附色谱法、洗脱法等类别中。Цвет 在世时其色谱法未受到青睐，其后 Kuhn 等参照其所述操作方法，用粉碎的碳酸钙填充色谱柱，成功地从蛋黄中分离出植物叶黄素，证明了蛋黄叶黄素是氧化类胡萝卜素的混合物[4]，表明这种沉寂多年的方法可用于分离和制备多种天然有机化合物，唤起人们重新注意和应用。Tiselius 则对此法进一步作出了重要发展[5,6]。

Martin 与 Synge 在 1941 年提出液液色谱法。他们以水饱和的硅胶为固定相，以氯仿与乙醇混合液为流动相，分离了乙酰基氨基酸，这是一种基于分配原理的分配色谱法[7]。

上述液相色谱法（现在称为经典液相色谱法）使用粗粒度填料，装在粗柱管中，固定相品种很少，流动相是受重力作用从色谱柱上端流过管柱，没有良好的检测器，因此柱效很低，分离能力差，使用不便，故仍长期停滞；至 1970 年以后出现高效液相色谱法，现代的流相色谱法才获得巨大发展。

这段时期 Consden 等发表了纸色谱法的论文[8]，Izmailov 等发表了薄层色谱法的论文[9]。经 Stahl 等人的努力，薄层色谱法在 1960 年后被广泛使用[10,11]。

气相色谱法源于用固体吸附气体的"涤气"技术。Schuftan[12]、Turner[13,14]、Damköhler 与 Thiele[15,16] 是气固色谱法的先驱，Claesson[17]、Туркельтауб[18]、Cremer 等[19]接踵于后。由于受固体吸附剂和检测器不良的限制，那时气固色谱法也是无大进展，唯 Janak 等用活性炭作吸附剂、二氧化碳作载气，计氮器作检测器分析气体的体积色谱法，起了些推动作用[20,21]。

Martin 曾指出气液色谱法的可行性[7]，但直到 1952 年才由 James 与他实现该预言[22,23]。他们既报道了用气相色谱法分析低沸点脂肪酸、胺类、吡啶同系物的结果，又在理论上对色谱流出曲线形成的形状、色谱的定性指标、影响色谱柱柱效的因素作了粗略的说明，奠定了气相色谱大发展的基础。

我国气相色谱法起步于 1954 年。中国科学院化学物理研究所（其前身为中国科学院石油研究所）的同志们先后作出我国气固色谱法、气液色谱法填充柱和毛细管柱的首张色谱图，并进行了早期的色谱理论和技术研究工作[24]。兰州、太原、北京、上海等地的一些研究单位，相继也开展了众多的色谱法研究与应用工作。至 1979 年召开第三次全国色谱学术报告会时，出席会议宣读气相色谱法方面论文的就有 40 多个单位，论文内容包括气相色谱理论的研究、色谱仪器设备的试制研究以及在石油、化工、生化、医药、环境监测、商品检验、气体分析等方面的应用研究。这表明当时我国已经有了一支较庞大的具有较高水平的气相色谱法研究队伍，并且在色谱的基础理论和应用研究方面已经取得一批接近国际先进水平的成果。其后我国气相色谱法的发展更加迅速，现在我国气相色谱工作者已发展壮大成有数之众的群体，分布在全国各地各行各业中，累累成果发表于全国色谱学术报告会。毛细管色谱学术报告会、石油化工色谱学术报告会等全国性会议和各省市范围的色谱学术报告会上，亦有很多发表在《色谱》、《分析测试学报》、《分析化学》等刊物中，其中不少成果已与世界同步，此处不赘述。

第二节　气相色谱法进展

气相色谱法是一种仪器分析法。使用的装置框图如图 1-1 所示，所得的样品分析结果（色谱图）如图 1-2。

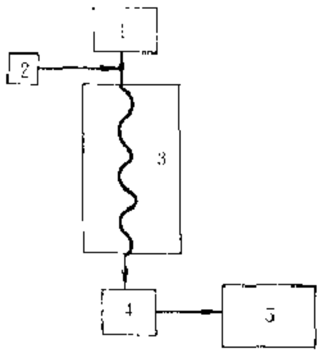


图 1-1　气相色谱装置框图

1 流动相；2 样品；3 色谱柱与固定相；
4 检测器；5 -数据记录及处理器

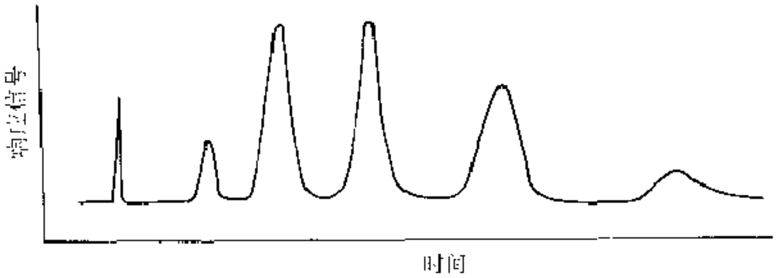


图 1-2　色谱流出曲线图（色谱图）

显然，只有不断地完善色谱理论，提高技术，改良仪器，才能改进组分的分离与分析，扩大气相色谱法的应用范围。

一、理 论 方 面

从色谱流出曲线（见图 1-2）可知，为了获得最佳分离结果，应满足的条件是：①最难分离的两个组分的色谱峰的位置相隔足够远；②此两色谱峰的峰宽却很窄。要满足这些条件，必须有最佳的色谱分离选择性和色谱柱的高效率。由于色谱操作条件改变会引起混合物组分诸色谱峰位置和峰宽相对的变化，这就促使人们要在理论上明瞭组分色谱峰位置的移动规律（位置的确定与定性）和峰宽变化的规律。色谱理论对这些作了许多启示。

在气相色谱过程热力学理论范畴，人们研究了组分保留值与热力学参数的关系、组分与固定液分子结构的关系、色谱定性等。如 Littlewood 等推导出组分在 0 ℃时的比保留体积（V_g 值）与溶解热（ΔH_s）的关系式❶ 为

$$\lg V_g = -\frac{\Delta H_s}{2.30RT_c} + A_1$$
$$= A_1 + B_1\left(\frac{1}{T_c}\right) \tag{1-1}$$

（1-1）式还表明，在除柱温外其他操作参数都不变的情况下，给定组分的 $\lg t'_R$、$\lg V_g$ 或 I 等保留值与柱温有倒数的线性关系。另外，在操作参数不变的情况下，组分的这些保留值还有以下经验的变化规律。

①碳数规律　同系物组分的碳数与它们的这些保留值有线性关系：

$$\lg t'_R = A_2 + B_2 N \tag{1-2}$$

式中 N 为组分碳数[22]。

②沸点规律　因同系物组分的沸点与碳数呈线性关系，故同系物组分的上述这些保留值与其沸点有线性关系[26]；具有相同碳数异构体的这些保留值与其沸点也有线性关系：

$$\lg V_g = A_3 + B_3 t_b \tag{1-3}$$

式中 t_b 为组分沸点[27]。

③双柱规律　同系物组分在两个不同极性固定液色谱柱上相应的保留值间具有线性关

❶ 式（1-1）～（1-14）中所用的符号的意义均见第二章第一节所述。

系[28,29]。

$$I=A_4-B_4I'$$ (1-4)

组分与固定液分子结构是决定分离选择性最重要的因素。不同的组分与固定液形成不同的相互作用力，如内聚力（包括色散力、诱导力和定向力）、氢键作用力等，可用组分在两相的分配系数（K）表征。两组分的 K 值相差愈大则愈易分离；用两组分的相对保留值（r）可表明两色谱峰相距的多少，

$$r=\frac{K_2}{K_1}=\frac{t'_{R2}}{t'_{R1}}=\frac{V_{g2}}{V_{g1}}=\frac{k_2}{k_1}$$ (1-5)

在气相色谱过程动力学理论范畴，人们研究了组分流出曲线的形状、影响峰宽的因素（色谱柱柱效的表征、操作条件的关系）等。在 Wilson 等提出的平衡色谱理论基础上[32,33]，Martin 等将色谱过程比拟如蒸馏，引入塔板理论[7,42~44]，推导出塔板理论方程式（流出曲线方程式）

$$c=\frac{m}{\sqrt{2\pi}}\cdot\frac{\sqrt{N}}{V_R}e^{-\frac{N}{2}\left(1-\frac{V}{V_R}\right)^2}$$ (1-6)

此式表示通过 V 体积载气后，离开 N 个塔板色谱柱时组分的浓度（c）。当 $V=V_R$ 时，指数项为零，有

$$c_{max}=\frac{m}{\sqrt{2\pi}}\cdot\frac{\sqrt{N}}{V_R}$$ (1-7)

由（1-7）式可知峰高（组分浓度）与进样量（m）、板数（N）、保留体积（V_R）之间的关系。这个半经验的理论推导出的色谱柱板数（N）和有效板数（N_{eff}），被用于表示色谱柱的效能。

$$N=5.545\left(\frac{t_R}{w_h}\right)^2=16\left(\frac{t_R}{w_b}\right)^2$$ (1-8)

$$N_{eff}=5.545\left(\frac{t'_R}{w_h}\right)^2=16\left(\frac{t'_R}{w_b}\right)^2=N\left(\frac{k}{1+k}\right)^2$$ (1-9)

须要指出，有效板数可用于说明两个组分在柱中分离的情况，N_{eff}愈大分离情况愈佳。除 k 值很大即 $t'_R\gg t_M$ 外，板数只能表征某组分色谱峰扩张的程度（t_M、N 值相同，N_{eff}不相同的色谱柱，两组分分离的情况会不同）。

色谱柱长为 L 时，可分别写出板高（H）和有效板高（H_{eff}），为

$$H=L/N$$ (1-10)

$$H_{eff}=L/N_{eff}$$ (1-11)

塔板理论对组分色谱流出曲线、保留值与峰宽度都能作出许多可取的说明，但不能解释哪些因素影响着峰宽，即相应的板高。

至 1956 年 van Deemter 等[34]在 Lapidus、Goldstein、Туницкий、Giddings 等[35~38]研究的速率理论基础上，提出了塔板高度受涡流扩散、分子扩散、液相传质阻力影响的速率理论方程式（后来补充气相传质阻力影响）。现在公认的 van Deemter 方程式为

$$\begin{aligned}H&=2\lambda d_p+\frac{2\gamma D_G}{\bar{u}}+\left[\frac{0.01k^2}{(1+k)^2}\cdot\frac{d_p^2}{D_G}+\frac{2k}{3(1+k)^2}\cdot\frac{d_f^2}{D_L}\right]\bar{u}\\&=A+\frac{B}{\bar{u}}+[C_G+C_L]\bar{u}\end{aligned}$$

$$=A+\frac{B}{\bar{u}}+C\bar{u} \tag{1-12}$$

此式还不断有人作修改，如涡流扩散与气相传质阻力之间偶合的影响，柱外效应的影响等修改。应该说，van Deemter 方程式不失为很好地揭示了寻求气液色谱填充柱高柱效的途径。

Golay 于 1956 年开始研究涂壁空心管色谱柱[39]，其后发表了用于气液色谱空心色谱柱的速率理论方程式[40,41]，

$$H=\frac{2D_G}{\bar{u}}+\frac{1+6k+11k^2}{24(1+k)^2}\cdot\frac{r_c^2}{D_G}\bar{u}+\frac{2k}{3(1+k)^2}\cdot\frac{d_f^2}{D_L}\bar{u} \tag{1-13}$$

(1-13) 式被称为 Golay 方程式，也很好地揭示了寻求气液色谱空心色谱柱高柱效的途径。

两组分的相对保留值只表征其色谱过程热力学的性质，只能表明其色谱峰是否有分离的可能性［参见公式 (1-5)］。至于两组分是否分离及分离的好坏，还要视其峰宽的情况，即需要有表征色谱过程动力学的数据。于是人们选用分离度 (R_S) 作为考察两组分分离情况的指标[40]。

$$R_S=\frac{2[t_{R2}-t_{R1}]}{w_{b2}+w_{b1}}=\frac{1}{4}\cdot\frac{r-1}{r}\cdot\sqrt{N_{eff}}=\frac{1}{4}\cdot\frac{r-1}{r}\cdot\sqrt{N}\cdot\frac{k}{1+k} \tag{1-14}$$

当两组分色谱峰峰形对称、面积大小接近时，若 $R_S\geqslant 1.5$，则此两组分可完全分离。另外从公式 (1-14) 可以看出，两色谱峰分离时 r 值稍大些，就可选用 N_{eff} 减小较多的色谱柱，足见选择固定液的重要。

对于多组分的分离，有很多色谱工作者进行过研究。我们在这方面的研究报道，请见文献[24]与[45]。

和国外在色谱理论研究工作的情况相似，我国色谱工作者也多专注于色谱热力学方面的探讨。上海、杭州、北京、吉林、兰州诸地的高等院校，大连、北京、成都、太原、济南诸地的科研单位，对色谱保留值的规律和热力学参数测定都有许多可喜的成果。

二、技 术 方 面

气相色谱法的进展常受许多技术发展的制约，现举数例作说明。

组分色谱峰流出色谱柱时，需要有优良的检测器对其进行测定，以便定性、定量。早期 Martin 使用的自动滴定器[22,23]和 Janak 使用的计氮器[20,21]只能测定少数特殊的组分。色谱工作者经过 20 多年的努力，研究出了 30 多种通用或专用的检测器[46~49]，其中热导检测器[17,50]、氢火焰离子化检测器[51,52]、电子俘获检测器[53,54]、火焰光度检测器[55,56]、氮磷检测器[57]、质谱仪[58]成为诸检测器中的佼佼者，是现在气相色谱法最常用的检测器[27]。当然这些检测器也还各有不足之处。

色谱柱的发展更是费时费事。虽然人们早知空心柱的柱效率远优于填充柱，可是制备空心柱的技术步履艰难。为了制备高柱效、长寿命的玻璃空心柱，色谱工作者创造了涂壁空心柱、多孔层空心柱、涂载体空心柱等色谱柱，并研究了不同涂渍方法[59~65]，至 1976 年出现 Madani 等[66,67]研制的化学交联法空心柱，才逐步取得好的结果[27,68,69]，虽然这种空心柱在高温使用还有困难。

1975 年前我国研制和使用的空心柱主要是玻璃的涂壁空心柱。国内只有少数单位掌握其技术，应用范围受到极大限制。后来转入多孔层空心柱和涂载体空心柱的研制时，中国科学院兰州化学物理研究所于 1975 年研究用有机胶法制备玻璃涂载体空心柱，次年获得成功，1977 年由天津试剂二厂批量生产，其创新的制备方法，达到国外此柱型的先进水平。随后石

油化工科学研究院（原石油部原石油科学研究院）首先在国内研制石英空心柱成功，从此空心柱才在国内广泛应用，并促使我国气相色谱分析水平普遍取得长足进步。

气相色谱分析的样品有气、液、固体三类，且其中有的组分彼此物理化学性质相差极大，有的含量差别极大，而色谱柱的柱容量也因柱型不同而有差异，色谱柱可能是在恒温或程序升温下操作，为了获得准确的色谱定性与定量结果，要求发展多种多样相应的进样方法，仅就空心管柱液体进样方法而论，就有载气是否分流和停流，样品是否直接进入色谱柱头，样品如何气化等不同组合方法。查阅文献[68，70]，可知晓一些进样方法的发展和应用情况。一般地说，气体样品最好用进样阀进样。固体样品按顶空分析法、裂解色谱分析法的要求进样，对于液体样品（包括溶解的固体样品），使用空心柱时，组分受热不易分解和含量为样品量的 100×10^{-6} 以上，没有（或甚少）溶剂的宽沸程样品，宜用分流式进样法；组分受热不易分解和含量为样品量的 $10\times10^{-9}\sim10\times10^{-6}$，有大量溶剂的样品，宜用不分流进样法；组分易受热分解和含量为样品量的 $10\times10^{-9}\sim10\times10^{-6}$ 的稀释样品，宜用冷柱头进样法。对于样品沸程甚宽则可进一步采用程序升温气化方式。使用柱容量大的色谱柱时，可用直接进样法。气相色谱法的进样方法，还有待进一步改进。

三、仪器方面

起初色谱工作者使用的都是自制的气相色谱仪，1954 年 Perkin-Elmer 公司首先有商品的填充柱气相色谱仪问世，在 1957 年还附售 26 种填充柱与之配套；又在 1959 年推出毛细管柱气相色谱仪。英国、日本、意大利等国随后也相继生产许多型号的色谱仪。这些色谱仪自动化程度和检测器的品质提高很快。1975 年以来，美国与日本的产品在我国占有颇大的市场。

中国科学院大连化学物理研究所在 1961 年至 1965 年期间，与大连第二仪表厂和天津试剂二厂分别合作研制并生产出我国最早的气相填充柱、毛细管柱色谱仪和制备色谱仪；其后北京、上海、南京、天津、重庆、山东省等地有多家工厂先后生产多种型号色谱仪，极大地满足了我国色谱工作者的需求，促进了我国气相色谱事业的发展。

工欲善其事，必先利其器，形势的发展要求国产气相色谱仪的性能不可落后于国外同类型仪器。1980 年在国家统一安排下，北京分析仪器厂引进了美国 Varian 公司的技术，生产了 SP-3400 与 SP-3700 等型号的气相色谱仪。中国科学院兰州化学物理研究所与上海分析仪器厂合作研制与生产 1001 型及改进的 1002 型气相色谱仪，已达到批量生产。中国科学院大连化学物理研究所以赶超国外仪器为目标，进行 1003 型（即人工智能型）气相色谱仪的研究；这项工作 1988 年通过中国科学院沈阳分院关于原理装置研究的鉴定。1995 年通过中国科学院的鉴定。此项工作内容甚宽，前期较注重理论与硬件的研究，后期注重软件的研究，并重点趋向专家系统的研制，今后研究工作转向开发，必定有更多工作待努力完成[71~110,27]。

现在我国不少厂家生产的气相色谱仪器，性能已接近国外较好的水平，请见第三章中所述。

第三节　气相色谱法展望

人们现在公认气相色谱法具有的优点、特点是：

①分离效率高，分析速度快。许多常规样品，用长约 2m 的填充柱就可奏效；用 50m 长涂有 OV-101 的空心柱，在 2h 内可将汽油样品分离出 200 多个色谱峰。

②选择性好。选用适当的固定相和柱温等操作条件，一些物理、化学性质相近的组分可

被分离开。如恒沸混合物、沸点相近的物质、简单的同位素、同分异构体、空间异构体、旋光异构体等，均可被分离开。

③样品用量少和检测灵敏度高。如气体样品量可为 1ml，液体样品量为 0.1μl，固体样品量为 *n* 微克；用电子俘获检测器与氮磷检测器可测定出几皮克含氯、含氮组分。

④操作简单，费用低少，应用广泛。这可从以下章节所述的内容理解，如今石油化工、环境保护、临床医学、农药、食品已成为主要应用领域。

气相色谱法是分析有机化合物不可缺少的一种分析手段。当然，它也有其局限性，如对一些异构体组分、受热易分解组分、蒸气压甚低的组分就可能无能为力，或需要衍生化后才能分离、分析。人们认为气相色谱法有难以判定组分是何物质，需要用纯样品进行定性、定量的缺点。其实这只是说明色谱仪检测组分的能力不足，尚需进一步开发能解决此问题的色谱检测器或发展如质谱仪那样与气相色谱仪联用的装置和方法。

综上所叙，可知气相色谱法仍有许多待解决之处．今后宜注重发展色谱过程热力学的研究，样品预处理与进样技术的研究，新的检测器及联用仪器的研究，智能色谱法的研究，使气相色谱法不断发展前进。

参 考 文 献

1 Pecsok R L，Shieds L D，Cairns T，et al. Modern Methods of Chemical Analysis. 2nd ed. New York：John Wiley & Sons，1976

2 Nogare S D，Juvet R S，Jr. Gas-Liquid Chromatogrphy. New York：Intersci Pub，1962：4

3 Цвет МС. Труды Варшавского общества естествоиспытателей，отделение Биологии，1903；14：20

4 Tswett M. Ber deutsch botan Ges，1906；21：316-384

5 Tswett M. Ber deutsch botan Ges，1907；25：217-267

6 Kuhn R，Winterstein A，Lederer E. Z physiol Chem，1931；197：141

7 Martin A J P，Synge R L M. Biochem J，1941；35：1358

8 Consden R，Gorden A H，Martin A J P. Biochem J，1944；38：225

9 Izmailov N A，Schraiber M S. Farmatsiya (Sofia)，1938；1(3)：1

10 Stahl E. Chem Ztg，1958；82：323

11 Stahl E. Thin Layer Chromatography. 2nd ed. Springer Verlag：Academic Press，1969

12 Schuftan P. Die Technische Gasanalyse. Leipzig：Hirzels

13 Turner N C. Petrol Refiner，1943；22：140

14 Turner N C. Natl Petroleum News，1943；35：R 234

15 Damkohler G，Thiele H. Angew Chem，1943：56：353

16 Damkohler G，Thiele H. Beih Ver Deut Chem，1943；(49)

17 Claesson S. Arkiv Kemi. Mineral Geol，1946：23A(1)：1

18 Туркельтауб Н М. Ж А Х，1950；5：200

19 Cremer E，Prior F，Z Elektrochem，1951：55：66，217

20 Janak J，Rusek M. Chem Listy，1953；47：1190

21 Janak J. Coll Cze Chem Comm，1954；19：917

22 James A T，Martin A J P. Biochem J，1952：50：679

23 James A T，Martin A J P. Analyst，1952：77：915

24 卢佩章，李浩春．分析化学，1979：7：357

25 Littlewood A B，Phillips C S G，Price D T. J Chem Soc，1955：1480

26 Ettre L S，Zlatkis A. The Practice of Gas Chromatoraphy. New York：John Wiley & Sons，1967：382

27 李浩春，卢佩章．气相色谱法．北京：科学出版社，1993

28 James A T. Biochem J, 1952; 52; 242

29 Pierotti G J, Deal C H, Derr E L, et al. J Am Chem Soc, 1956; 78; 2989

30 Tiselius A. Arkiv Kemi Mineral Geol, 1940; 14B(22):5

31 Tiselius A. Arkiv Kemi Mineral Geol, 1943; 16A(18):11

32 Wilson J N. J Am Chem Soc, 1940; 62; 1583

33 De Vault D. J Am Chem Soc, 1943; 65; 532

34 Van Deemter J J, Zuiderweg F J, Klinkenberg A. Chem Eng Sci, 1956; 5; 271

35 Lapidus L, Amundson N R. J Phys Chem, 1952; 50; 984

36 Goldstein S. Proc Roy Soc, 1953; 219; 151

37 Туницкий Н Н. ДАН СССР, 1954; 94; 577

38 Giddings J C, H Eyring. J Phys Chem, 1955; 59; 416

39 Ettre L S. Open Tubular Column in Gas Chromatography. New York: Plenum Press, 1956

40 Golay M J E. In Coates V J, Noebels H J, Fagerson L S, ed. Gas Chromatography, New York: Academic Press, 1958; 1

41 Golay M J E. In Desty D H, ed. Gas Chromatography 1958. London: Butterworths, 1958; 36

42 Mayer S W, Tompkins E R. J Am Chem Soc, 1947; 69; 2866

43 Glueckauf E. Trans Faraday Soc, 1955; 51; 34

44 Klinkenberg A, Sjenitzer F. Chem Eng Sci, 1956; 5; 258

45 卢佩章，戴朝政. 色谱理论基础. 北京：科学出版社，1989

46 David D J. Gas Chromatographic Detectors. New York: John Wiley & Sons, 1974

47 Sevick J. Detectors in Gas Chromatography. New York: Elsevier Publ Co, 1976

48 Бражников В В. Дифференциальные Детекторы Для Газовой Хроматографии. Москва: НАУКА, 1974

49 Oehme M. Gas Chromatographische Detectoren Bad Durkheim: Huthig, 1982

50 Ray N H. J appl Chem (London), 1954; 4; 82

51 Mc William I C, Dewar R A. In Desty D H, ed. Gas Chromatography 1958. London: Butterworth, 1958; 142

52 Harley J, Nel W, Pretorius V. Nature, 1958; 181; 177

53 Lovelock J E, Lipsky S R. J Am Chem Soc, 1960; 82; 431

54 Lovelock J E. Anal Chem, 1961; 33; 162

55 Brody S S, Chaney J E. J Gas Chrom, 1966; 4; 42

56 Bowman M, Beroza M. Anal Chem, 1968; 40; 1148

57 Kolb B, Bischoff J. J Chrom Sci, 1974; 12; 625

58 Homlmes J C, Morrell F A. Appl Spectrosc, 1957; 11; 86

59 Dijkstra G, de Goey J. In Desty D H, ed. Gas Chromatography 1958. London: Butterworths, 1958; 56

60 Ettre L S. Open Tubular Columns in Gas Chromatography. New York: Plenum Press, 1965

61 Jennings W. Gas Chromatography with Glass Capillary Columns. New York: Academic Press, 1978

62 Lee M L, Wright B W. J Chromatogr, 1980; 184; 235

63 Bertsch W, Jennings W G, Kaiser R E. Recent Advances in Capillary Gas Chromatography. vl. Bad Durheim: Huthig, 1981

64 Jennings W G. Comparisons of Fused Silica and Other Glass Columns in Gas Chromatography. Bad Durkheim: Huthig, 1981

65 Grob K. Making and manipulating Capillary Columns for Gas Chromatography. Bad Durkheim: Huthig, 1986

66 Madani C, Chambaz E M, Rigauid M, et al. J Chromatogr, 1976; 126; 161

67 Grob K, Grob G, Grob K, Jr. J Chromatogr, 1981; 211; 243

68 吴采樱，曾昭睿. 现代毛细管柱气相色谱法. 武汉：武汉大学出版社，1990

69 周良模. 气相色谱新技术. 北京：科学出版社，1994

70 Sandra P. Sample Introduction in Capillary Gas Chromatography. vI. Bad Durkheim: Huthig, 1985

71 卢佩章，李浩春. 见：中国化学会编. 中国化学会五十周年学术报告会文集. 南京：中国化学会，1982; 434

72 卢佩章，李浩春. 仪器仪表学报，1983; 4(3):237

73 李浩春，戴朝政，徐方宝等．科学通报，1983；28：84

74 Li Haochun, Dai Chaozheng, Xu Fangbao, et al. In Lu Peichang, Bayer E, ed. Proceeding of Sino-West German Symposium on Chromatoraphy. Beijing: Sci Pres, 1983: 342

75 Li Haochun, Lin Bingsen, Luo Chunrong, et al. Abstracts of 15th Internation Symposium of Chromatography, 1984, Abstr 2PF 58.

76 Li Haochun, Li Bingsen, Chu Xinhua, et al. Abstracts of 15th Internation Symposium of Chromatography, 1984; Abstr 2PF 59.

77 修振佳，李浩春，卢佩章．色谱，1985；2：141

78 Lu Peichang, Li Haochun, Lin Bingsen. Abstracts of 1985 Pittsburgh Conference, 1985: Abstr No 241

79 Lin Bingcheng, Chu Xinhua, Luo Chunrong, et al. Proceedings of Ist Beijing Conf and Exhib on Instrum Analysis, v2, 1985: 2081

80 Lu Peichang, Li Haochun, Dai Chaozheng. Proceedings of 1st Beijing Conf and Exhib on Instrum Analysis, v2, 1985: 2232

81 李浩春，林彬生，罗春荣等．中国科学（B辑），1985：(5)：449

82 林彬生，李浩春，卢佩章．色谱，1986；4：193

83 赖聪，卢佩章，李浩春．研究生院学报，1986；3(2)：118

84 Lu Peizhang, Li Haochun, Lin Lingsen, et al. Atstracts of 1986 Pittburgh Conference, 1986; Abstr No?2

85 Lin Binsheng, Li Haochun, Lu Peichang. LC GC, 1986; 4: 106

86 夏爱竹，叶芬，林炳承等．第六次全国色谱学术报告会文集，1987：157

87 李浩春，戴朝政．色谱，1987；5：135

88 卢佩章，李浩春，张玉奎等．第二届知名色谱学者讲学班资料汇编．1987：21

89 Lu Peichang, Li Haochun, Zhang Yukui, et al. Proceedings of 2nd Beijing Conf and Exhib on Instrum Analysis. v2, 1987: 807

90 Lu Peichang, Li Haochun, Dai Chaozheng, et al. Proceedings of 2nd Beijing Conf and Exhib on Instrum Analysis. v2, 1987: 933

91 赖光德，李浩春，卢佩章．第五次全国色谱学术报告会文集，1985：86

92 李浩春，林炳承，楮新华等．色谱，1988；6：65

93 李浩春，邸凌，林彬生等．色谱，1989；7：1

94 戴朝政，吕建生，卢佩章等．色谱，1989；7：135

95 修振佳，李浩春，于伟等．色谱，1989；7：371

96 修振佳，李浩春，吴昌滨等．色谱，1989；7：295

97 许国旺，李浩春，卢佩章．第七次全国色谱学术报告会文集，1989：554

98 黄铃，李浩春，卢佩章．第七次全国色谱学术报告会文集，1989：571

99 李浩春，邸凌，张祥民等．第七次全国色谱学术报告会文集，1989：627

100 卢佩章，张祥民，邹汉法等．分析化学，1989；17：888

101 邹汉法，张玉奎，赖光德等．中国科学（B辑），1989；3：225

102 戴朝政，卢佩章，李浩春．中国科学（B辑），1990；5：480

103 许国旺，卢佩章．第八次全国色谱学术报告会文集，1991；550

104 修振佳，李浩春，张玉奎．色谱，1993；11：42

105 张玉奎，张祥民，邹汉法等．第九次全国色谱学术报告会文集，1993：3

106 张祥民，许国旺，罗春荣等．第九次全国色谱学术报告会文集，1993：558

107 许国旺，张祥民，杨黎等．第九次全国色谱学术报告会文集，1993：569

108 杨黎，卢佩章，许国旺．第九次全国色谱学术报告会文集，1993：580

109 许国旺，张祥民，罗春荣等．第九次全国色谱学术报告会文集，1993：588

110 卢佩章，许国旺．气相色谱法专家系统．济南：山东科学技术出版社，1994

（李浩春）

第二章　气相色谱法符号与术语

第一节　常 用 符 号

在气相色谱法发展的过程中，色谱工作者曾创造许多色谱法术语和使用许多有关符号，并在相互交流的活动中，逐渐把一些术语和符号统一起来了，有些团体和个人也曾为此作过一些工作[1~8]，但目前符号统一工作远不及术语。以下是气相色谱工作者较普遍使用的符号。

撰写本分册时，我们使用了这些气相色谱符号（非气相色谱的符号则在书中出现之处有相应的说明）。

一、英 文 符 号

A　峰面积，单位为 cm^2 或 $mV\cdot s$；van Deemter 公式中的涡流扩散项，单位为 cm；Antoine 公式中的常数；吸收强度，单位为 mV。

A_i　组分 i 的峰面积，单位为 cm^2 或 $mV\cdot s$。

A_{st}　参比物质的峰面积，单位为 cm^2 或 $mV\cdot s$。

B　van Deemter 公式中的分子扩散项单位为 $cm^2\cdot s^{-1}$；Antoine 公式中的常数。

B_0　管柱渗透性［填充柱 $B_0\approx d_p^2/1000$；空心柱 $B_0=r_c^2/8$］。

C　van Deemter 公式中的传质速率项，单位为 s^{-1}；Antoine 公式中的常数。

C_G　组分在气相中的浓度，单位为 $g\cdot ml^{-1}$；van Deemter 公式中组分在气相中的传质速率项，单位为 s^{-1}。

C_L　组分在液相中的浓度，单位为 $g\cdot ml^{-1}$；van Deemter 公式中组分在液相中的传质速率项，单位为 s^{-1}。

C_0　进样浓度。

CE　涂渍效率［$CE=(H_{min}/H)\times 100$］，单位为%。

D　检测器的检测限［$D=2N/S$］，单位为 $mg\cdot ml^{-1}$、$ml\cdot ml^{-1}$或 $g\cdot s^{-1}$；扩散系数，单位为 $cm^2\cdot s^{-1}$。

D_G　组分在气相中的扩散系数，单位为 $cm^2\cdot s^{-1}$。

D_g　以 $mg\cdot ml^{-1}$为单位的检测器的检测限。

D_l　组分在液相中的扩散系数，单位为 $cm^2\cdot s^{-1}$。

D_t　以 $g\cdot s^{-1}$为单位的检测器的检测限。

D_v　以 $ml\cdot ml^{-1}$为单位的检测器的检测限。

E　电场强度；分子间相互作用力。

F　载气平均体积流量［柱温和色谱柱平均压力下的载气体积流量］，单位为 $ml\cdot min^{-1}$。

F_a　载气实际体积流量［色谱柱出口处温度和压力下（不包括水蒸气压）的载气体积流量］，单位为 $ml\cdot min^{-1}$。

F_c　载气校正体积流量[柱温和色谱柱出口处压力下的载气体积流量]，单位为 $ml \cdot min^{-1}$。

F_a　载气视体积流量［色谱柱出口处温度和压力下（包括水蒸气压）的载气体积流量］，单位为 $ml \cdot min^{-1}$。

G　自由能。

H　板高，单位为 mm。

H_{eff}　有效板高，单位为 mm。

H_{min}　最佳的载气平均线速时的板高$\left[H_{min}=r_c\sqrt{\frac{1+6k+11k^2}{3(1+k)^2}}\right]$，单位为 mm。

I　保留指数；
　电离能；
　电流，单位为 A。

I^T　线性程序升温保留指数。

I_0　基始电流，单位为 mA。

J　McReynolds 溶剂常数［标准物：1-碘丁烷］。

K　分配系数；
　McReynolds 溶剂常数［标准物：2-辛炔］。

L　柱长，单位为 m；
　McReynolds 溶剂常数［标准物：1,1-二噁烷］。

M　相对分子质量；
　基线漂移，单位为 $mV \cdot h^{-1}$；
　McReynolds 溶剂常数［标准物：1-顺四氢化茚］。

N　板数；
　检测器噪声，单位为 mV。

N_{eff}　有效板数。

N_{req}　达到给定分离度所需的板数［$N_{req}=16R_s^2\{\alpha/(\alpha-1)\}^2\{(k+1)/k\}^2$］。

P　相对压力［$P=p_i/p_o$］。

R　阻滞因子［$R=1/(k+1)$］；
　气体常数；
　电阻单位为 Ω。

R_h　程序升温速度，单位为℃·min^{-1}。

R_s　分离度。

S　检测器的灵敏度；
　熵；
　Rohrschreider 溶剂常数［标准物：吡啶］。

S_g　以 $mV \cdot ml \cdot mg^{-1}$为单位的检测器灵敏度。

S_t　以 $mV \cdot s \cdot g^{-1}$为单位的检测器灵敏度。

S_v　以 $mV \cdot ml \cdot ml^{-1}$为单位的检测器灵敏度。

S'　McReynolds 溶剂常数［标准物：吡啶］。

SN　分离数。

T　以热力学温度表示的温度，单位为 K。

T_a　以热力学温度表示的室温，单位为 K。

T_c　以热力学温度表示的柱温，单位为 K。

T_f　以热力学温度表示的程序升温终结的柱温，单位为 K。

T_i　以热力学温度表示的程序升温开始的柱温，单位为 K。

T_o　以热力学温度表示的色谱柱出口处温度单位为 K。

T_R　程序升温时组分的保留温度。

U　Rohrschneider 溶剂常数［标准物：硝基甲烷］。

U'　McReynolds 溶剂常数［标准物：硝基丙烷］。

V　体积，单位为 L 或 ml；

　电压，单位为 V 或 mV。

V_{ext}　柱外体积，单位为 ml。

V_G　柱内气相体积，单位为 ml。

V_g　于 0℃ 时比保留体积，单位为 $ml \cdot g^{-1}$。

V_g^θ　于柱温时比保留体积［$V_g^\theta = V_N / m_L$］，单位为 $ml \cdot g^{-1}$。

V_i　组分 i 的体积，单位为 ml。

V_L　柱内液相体积［$V_L = m_L / \rho$］，单位为 ml。

V_M　死体积，单位为 ml。

V_N　净保留体积，单位为 ml。

V_R　保留体积，单位为 ml。

V_R^0　校正保留体积，单位为 ml。

V'_R　调整保留体积，单位为 ml。

V'_{Ri}　组分 i 的调整保留体积，单位为 ml。

$V'_{R(st)}$　参比组分的调整保留体积，单位为 ml。

V_{st}　参比物质的体积单位为 ml。

X　Rohrschneider 溶剂常数［标准物：苯］。

X'　McReynolds 溶剂常数［标准物：苯］。

Y　Rohrschneider 溶剂常数［标准物：乙醇］。

Y'　McReynolds 溶剂常数［标准物：1-丁醇］。

Z　在组分 i 之前流出的正构烷烃碳数；

　Rohrschneider 溶剂常数［标准物：丁酮］。

$(Z+1)$　在组分 i 之后流出的正构烷烃碳数。

Z'　McReynolds 溶剂常数［标准物：2-戊酮］。

a　吸附量；

　峰宽与保留值关系式中的常数；

　Rohrschneider 溶质常数［标准物：苯］。

b　峰宽与保留值关系式中的常数；

　Rohrschneider 溶质常数［标准物：乙醇］。

c　Rohrschneider 溶质常数［标准物：丁酮］。

c_1　记录器的灵敏度，单位为 $mV \cdot cm^{-1}$。

c_2　记录纸速的倒数，单位为 min·cm^{-1}。

d　距离；Rohrschneider 溶质常数［标准物：硝基甲烷］。

d_c　柱内径，单位为 mm。

d_f　固定液液膜厚度，单位为 μm。

dI　相同柱温和固定液时两个组分保留指数之差。

d_R　色谱图上从进样至峰高最大值处的距离，单位为 cm。

d_p　载体或吸附剂颗粒纵径，单位为 mm。

e　Rohrschneider 溶质常数［标准物：吡啶］。

f　相对定量校正因子［$f=1/s$］；
　逸度；
　频率。

f_M　相对摩尔校正因子。

f_V　相对体积校正因子。

f_m　相对质量校正因子。

h　峰高，单位为 cm。

j　压力梯度校正因子。

k　容量因子。

m　试样的质量，单位为 g。

m_L　固定液的质量，单位为 g。

m_i　组分 i 的质量，单位为 g。

m_{st}　参比物质的质量，单位为 g。

n　折射率；
　进样次数。

p　压力，单位为 MPa。

p^o　饱和蒸气压，单位为 Pa。

p_a　常压，单位为 MPa。

p_c　临界压力，单位为 Pa。

p_i　色谱柱进口处压力，单位为 MPa。

p_0　色谱柱出口处压力，单位为 MPa。

p_W　室温的水蒸气分压，单位为 Pa。

q　柱的横截面积，单位为 mm^2。

r　相对保留值；
　分子间距离。

r_c　柱内半径，单位为 mm。

r_G　末调整的相对保留值［$r_G=V_{R_i}/V_{R(st)}=t_{R_i}/t_{R(st)}=(k_i+1)/(k_{st}+1)$］。

s　相对响应值。

s_m　相对质量响应值。

s_M　相对摩尔响应值

s_V　相对体积响应值。

t　　时间，单位为 min 或 s；
　　以摄氏温度表示的温度，单位为℃。
t_a　　以摄氏温度表示的室温，单位为℃。
t_c　　以摄氏温度表示的柱温，单位为℃。
t_D　　以摄氏温度表示的检测器温度，单位为℃。
t_M　　用甲烷测定的死时间，单位为 min。
t_N　　净保留时间，单位为 min。
t_R　　保留时间，单位为 min。
t_R^T　　线性程序升温保留时间，单位为 min。
t_R^0　　校正保留时间，单位为 min。
t'_R　　调整保留时间，单位为 min。
t'_{Ri}　　组分 i 的调整保留时间，单位为 min。
$t'_{R(st)}$　　参比组分的调整保留时间，单位为 min。
t_V　　以摄氏温度表示的气化室的温度，单位为℃。
t_0　　用空气测定的死时间，单位为 min。
u　　速度。
u_0　　柱出口处的载气线速，单位为 $cm \cdot s^{-1}$。
$\overline{u}$　　载气平均线速 $[\overline{u}=L/t_M=ju_0]$。
w　　峰宽，单位为 cm 或 min。
w_b　　底峰宽 $[w_b=4\sigma]$，单位为 cm 或 min。
w_h　　半高峰宽 $[w_h=2.355\sigma]$，单位为 cm 或 min。
w_i　　拐点峰宽 $[w_i=2\sigma]$，单位为 cm 或 min。

二、希腊文符号

ΔH_V　　蒸发热。
ΔI　　相同柱温和不同固定液时同一组分保留指数之差。
ΔQ　　物质量的变量。
ΔR　　响应值的变量。
Δp　　柱压降，单位为 MPa。
Δt　　两峰顶之间的距离，单位为 cm 或 min。
α　　分离因子 $[\alpha=t'_{R2}/t'_{R1}=k_2/k_1]$。
β　　相比率。
γ　　活度系数；
　　van Deemter 公式中的气体扩散路径弯曲因子。
δI　　不同柱温和相同固定液时同一组分保留指数之差。
ε　　柱内颗粒间的孔隙率。
η　　粘度，单位为 $Pa \cdot s$。
λ　　波长，单位为 nm；
　　填充不均匀性因素。

μ 化学势；

偶极矩。

ρ_l 固定液密度，单位为 $g \cdot ml^{-1}$；

溶剂相对密度。

σ 高斯函数的标准偏差。

τ 指数衰减的时间常数。

三、角　标

（一）下角标

G	气相。	exp	实验值。
L	液相。	i	组分 i。
N	净的。	max	最大。
R	保留。	min	最小。
a	环境的。	o	柱出口。
c	色谱柱。	opt	最佳。
cal	计算值。	st	参比物质。
eff	有效值。		

（二）上角标

T 表示程序升温分析所得数值。

′ 调整的。

° 校正的。

第二节　术语的定义

现将重要的气相色谱法术语分成十三类，分别作了释义，并编写了相应的中英文索引。

一、色谱方法

（1）气相色谱法（gas chromatography，GC）　气相色谱法是以气体为流动相的色谱法。它利用物质在流动相与固定相中分配系数的差异，当两相作相对运动时，被测样品组分在两相之间进行反复多次分配．诸组分的分配系数纵然只有微小差异，随着流动相（气体）的移动也可以有差距，最后被测样品组分可得到分离，并被测定。

（2）气液色谱法（gas liquid chromatography，GLC）　流动相为气体，固定相为液体的色谱法。

（3）气固色谱法（gas solid chromatography，GSC）　流动相为气体，固定相为固体（一般指吸附剂）的色谱法。

（4）填充气相色谱法（packed column gas chromatography）　使用填充色谱柱的气相色谱法。

（5）毛细管气相色谱法（capillary column gas chromatography）　使用毛细管色谱柱的气相色谱法。

（6）程序升温气相色谱法（programmed temperature gas chromatography）　将色谱柱按

照预定的程序连续地或分阶段地进行升温的气相色谱法。

（7）反应气相色谱法（reaction gas chromatography） 样品经过色谱柱前、柱内或柱后反应区，进行化学反应的气相色谱法。

（8）裂解气相色谱法（pyrolysis gas chromatography） 样品经过高温、激光、电弧等途径，裂解为较小分子后进入色谱柱的气相色谱法；是反应气相色谱法的一种。

（9）顶空气相色谱法（head space gas chromatography） 对密闭系统中与液体（或固体）样品处于热力学平衡状态的气相组分，进行气相色谱分析的方法：可测定样品中挥发性组分。

（10）制备气相色谱法（preparative gas chromatography） 用能处理较大量样品的色谱仪器，进行分离、切割和收集组分，以获取纯化合物的气相色谱法。

（11）多维气相色谱法（multidimensional gas chromatography） 将两个或更多个色谱柱组合，通过切换，可对组分进行正吹、反吹或切割等操作的气相色谱法。

（12）柱色谱法（column chromatography） 此法固定相装在色谱柱内。

（13）洗脱色谱法（elution chromatography） 将样品加到色谱柱的上端，流动相连续通过柱中固定相；流动相与固定相的作用力比与样品组分的作用力弱，从而使样品组分按其与固定相作用力由弱到强的顺序从色谱柱下端流出，达到分离。

（14）迎头色谱法（frontal chromatography） 此法样品本身就是流动相，样品连续流经色谱柱，在固定相上吸附力（或溶解力）最弱的组分首先以纯物质的状态流出色谱柱，然后按着组分吸附力（或溶解力）从弱到强的顺序，依次流出其他组分。

（15）顶替色谱法（displacement chromatography） 流动相是置换剂，它对固定相的吸附力（或溶解力）比样品组分强。样品加到色谱柱后，使置换剂流经色谱柱，则按吸附力（或溶解力）从弱到强的顺序，依次将组分顶替出色谱柱。

（16）线性色谱法（linear chromatography） 此法的特点为分配系数是与溶质浓度无关的常数，故能获得对称的色谱峰。溶质保留时间不随浓度变化。

（17）非线性色谱法（non-linear chromatography） 此法分配系数随溶质浓度增大而变化，获得的色谱峰不对称。

二、色谱曲线

（1）色谱图（chromatogram） 进样后记录仪器记录下来的检测器响应信号随时间或载气流出体积而分布的曲线图（即色谱柱流出物通过检测器系统时所产生的响应信号对时间或载气流出体积的曲线图），称为色谱图。

（2）流出曲线（elution curve） 色谱图中随时间或载气流出体积变化的响应信号曲线，称为流出曲线。由微分型检测器绘得的流出曲线是微分曲线；由积分型检测器绘得的是积分曲线。分别如图 2-1 所示。

（3）阶（step） 有组分流出时，积分流出曲线如同台阶一般；图 2-1（b）中的曲线 NP 和曲线 CED 都是阶。

（4）阶底（step base） 每个阶起点的水平延长线是相应阶的阶底。图 2-1（b）中的直线 CO 是阶 CED 的阶底。

（5）阶高（step height） 阶顶点处至阶底的垂直距离。图 2-1（b）中的 DO。

（6）阶斜率（slope of step） 在阶的半高处作切线与阶底的交角为 θ，其正切 $\tan\theta$ 称为

阶斜率。

（7）色谱峰（peak） 有组分流出时，微分流出曲线出现峰状。图 2-1（a）中的曲线 NAP 和曲线 $CHEJD$ 都是色谱峰。

（8）峰底（peak base） 色谱峰起点与终点的连接直线是峰底。图 2-1（a）中的直线 CD。

（9）峰高（peak height） 色谱峰最大值至峰底的垂直距离。图 2-1（a）中的 EB。

（10）底峰宽（peak widthat base） 色谱峰两侧拐点处所作切线与峰底相交两点间的距离。图 2-1（a）中的 K 和 L 两点间的距离。

（11）半高峰宽（peak width at half height） 通过峰高的中点作平行峰底的直线，此直线与峰两侧的交点之间的距离，是半高峰宽。图 2-1（a）中 H 和 J 两点间的距离。

（12）拐点（inflection point） 色谱峰上二阶导数等于零的点。图 2-1（a）中的 F 与 G。

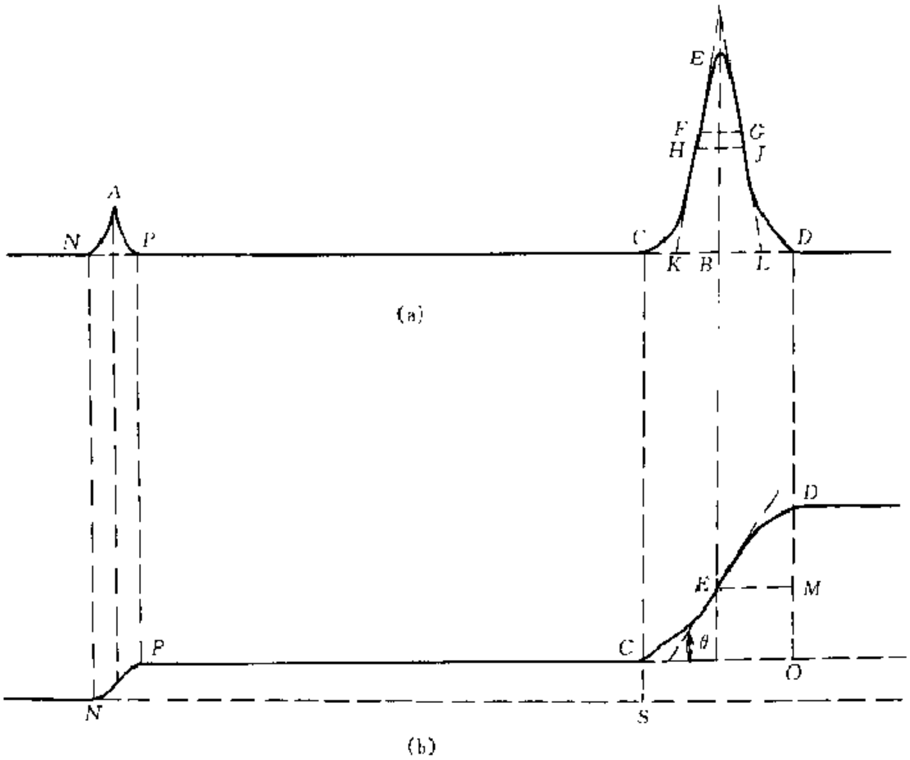


图 2-1 色谱流出曲线

（a）微分流出曲线；（b）积分流出曲线

（13）拐点峰宽（peak width at inflection points） 色谱峰拐点之间的距离。图 2-1（a）中 F 和 G 两拐点之间的距离。

（14）前伸峰（leading peak） 前沿平缓后部陡起的不对称色谱峰。

（15）拖尾峰（tailing peak） 前沿陡起后部平缓的不对称色谱峰。

（16）畸峰（distorted peak） 形状不对称的色谱峰，如前伸峰、拖尾峰。

（17）反峰（negative peak） 出峰方向与通常方向相反的色谱峰。反峰又称倒峰、负峰。形成反峰的原因颇多，如在正常情况下，使用热导池检测器时，若载气的热导率小于载气与组分的混合热导率就会出现反峰。在不正常情况下，热导池桥电流过高、载气的涌浪效应等都会产生反峰。

（18）假峰（ghost peak） 除组分正常产生的色谱峰之外，由于各种原因出现的色谱峰。

例如组分造成气化室的记忆效应产生的色谱峰等。

(19) 总离子流色谱图 (total ionic chromatogram)　GC-MS 联用仪总离子流检测电极收集的离子流随时间变化的曲线称为总离子流色谱图。

三、色　谱　仪

(1) 气相色谱仪 (gas chromatograph)　气相色谱法用的装置。主要由气流系统、色谱分离系统、温度控制系统、检测系统、数据处理及其他辅助部件等组成。

(2) 填充柱色谱仪 (packed column chromatograph)　使用填充色谱柱的气相色谱仪。

(3) 毛细管柱色谱仪 (capillary column chromatograph)　使用毛细管柱的气相色谱仪。

(4) GC-MS 联用仪 (gas chromatograph-mass spectrometer)　由气相色谱仪与质谱仪组合成的仪器。GC 仪器分离的样品组分在 MS 仪器上测定。

(5) GC-FTIR 联用仪 (gas chromatograph-Fourier transform infrared spectrometer)　由气相色谱仪与傅里叶变换红外光谱仪组合成的仪器。GC 仪器分离的样品组分，进入傅里叶变换红外光谱仪，绘出相应组分的气态红外光谱图，得到定性结果。

(6) 反应色谱仪 (reaction gas chromatograph)　用于反应色谱法的气相色谱仪。它有能使组分发生变化的部件。

(7) 裂解色谱仪 (pyrolysis gas chromatograph)　它属于反应色谱仪的一种，有能使样品裂解的装置；裂解生成的低分子量产物在色谱柱中被分离，经检测器检定。

(8) 制备色谱仪 (preparative gas chromatograph)　用气相色谱法制备纯组分的一种填充柱气相色谱仪。

(9) 流程气相色谱仪 (process gas chromatograph)　用于生产过程的质量控制，能按设置程序自动连续地测定样品组分的气相色谱仪。

(10) 多维气相色谱仪 (multidimensional gas chromatograph)　用于多维气相色谱法的装置。

四、流　动　相

(1) 流动相 (mobile phase)　气相色谱法的流动相是在色谱柱中用以携带样品和洗脱其组分的气体。

(2) 载气 (carrier gas)　用作流动相的气体。

(3) 进口压力 (inlet pressure)　色谱柱入口处载气的绝对压力。

(4) 出口压力 (outlet pressure)　色谱柱出口处载气的绝对压力。

(5) 柱压降 (pressure drop)　色谱柱入口处与出口处的压力差值。即 $\Delta p = p_i - p_o$。

(6) 相对压力 (relative pressure)　色谱柱入口处压力与出口处压力的比值。

(7) 压力梯度校正因子 (pressure gradient correction factor)　用以校正在色谱柱中由于载气的可压缩性所产生的压力梯度的因子。其计算公式为

$$j = \frac{3}{2}\left[\frac{\left(\frac{p_i}{p_o}\right)^2 - 1}{\left(\frac{p_i}{p_o}\right)^3 - 1}\right]$$

(8) 载气视体积流量 (practical flow rate)　柱出口处温度和压力下（含饱和水蒸气压）测

得的载气体积流量。

（9）载气实际体积流量（actual flow rate）　在柱出口处温度和压力下（不含饱和水蒸气压）的载气体积流量。

$$F_a = F_o \cdot \frac{p_o - p_w}{p_o}$$

（10）载气校正体积流量（corrected flow rate）　柱温和柱出口压力下的载气体积流量。

$$F_c = F_a \cdot \frac{T_c}{T_a}$$

（11）载气平均体积流量（average flow rate）　柱温和柱平均压力下的载气体积流量，$F = F_c j$。

（12）载气线速（linear velocity）　载气沿色谱柱轴向移动的速度。

（13）载气柱出口线速（linear velocity at column outlet）　在色谱柱出口处的载气线速。

$$u_o = \frac{F_a}{\Sigma q}$$

（14）载气平均线速（average linear velocity）　色谱柱平均压力下的载气线速，$\bar{u} = u_o j$。

五、固　定　相

（1）固定相（stationary phase）　色谱柱内不移动的、起分离作用的活性物质。

（2）固体固定相（solid stationary phase）　气固色谱法的固定相，是固体的物质。

（3）吸附剂（adsorbent）　具有吸附活性并用于色谱分离的固体物质。

（4）化学键合相（chemically bonded phase）　用化学反应方法将有机特定基团以共价键联接在硅胶、氧化铝、硅藻土等基质上制成的固定相。

（5）高分子多孔小球（porous polymer beads）　苯乙烯和二乙烯基苯的共聚物或其他共聚物的多孔小球，可以单独或涂渍固定液后作为固定相。

（6）固定液（stationary liquid）　固定相的组成部分；指涂渍在载体或色谱柱内壁表面上起分离作用的液体物质。

（7）载体（support）　承载固定液的惰性固体称为载体，又称担体。

（8）液体固定相（liquid stationary phase）　气液色谱法的固定相，由固定液和载体组成。

（9）涂渍溶液（coating solution）　用适当溶剂溶解固定液制成含一定浓度固定液的溶液，用于涂渍在载体或毛细管柱内壁上。

（10）McReynolds 常数（McReynolds constants）　某固定液与角鲨烷于给定柱温下的某些物质保留指数差值，可表征该固定液的性质。此差值为该固定液的特征常数❶。

六、色　谱　柱

（1）色谱柱（chromatographic column）　内有固定相用以分离样品组分的柱管。

（2）填充柱（packed column）　填充了固定相的色谱柱。

（3）微填充柱（micro-packed column）　填充了微粒固定相的内径一般为（0.5～1）mm 的色谱柱。

---

❶ 固定液特征常数有 Rohrschneider 常数和 McReynolds 常数两种，后者选用的物质有苯、丁醇、2-戊酮、硝基丙烷、吡啶、2-甲基-2-戊醇、1-碘丁烷、2-辛炔、1,4-二噁烷、1-顺四氢化茚等 10 种，给定柱温为 120 ℃，通常只用前五个 McReynolds 常数就可评估该固定液的平均极性。

（4）吸附柱（adsorption column） 用具有吸附活性的固定相，如硅胶、氧化铝、分子筛、活性炭等，填充而成的色谱柱。

（5）毛细管柱（capillary column） 内径一般为（0.1～0.5）mm 的色谱柱。

（6）空心柱（open tubular column） 柱管内壁有固定相的开口的毛细管柱。

（7）涂壁空心柱（wall coated open tubular column，WCOT） 内壁上直接涂渍固定液的空心柱。

（8）处壁空心柱（wall treated open tubular column，WTOT） 广义的处壁空心柱是指柱内壁进行物理或化学方法处理的空心柱，狭义的是指化学处理的空心柱。现多用后者。

（9）多孔层空心柱（porous layer open tubular column，PLOT） 内壁上有吸附剂或惰性固体的空心柱。

（10）涂载体空心柱（support coated open tubular column，SCOT） 内壁上沉积载体后涂渍固定液的空心柱。是多孔层空心柱的一种。

（11）填充毛细管柱（packed capillary column） 将吸附剂或载体疏松地装在玻璃管中，然后拉制成内径一般为（0.25～0.5）mm 的毛细管柱。

（12）化学键合空心柱（chemical bonded open tubular. column） 用固定液与柱管内壁的基团共价键合的方法制备的空心柱。

（13）化学交联空心柱（chemical crosslinked open tubular column） 用固定液在柱管内壁聚合（交联）的方法制备的空心柱。

（14）液相载荷量（liquid phase loading） 在填充柱中，固定液与固定相（包括固定液和载体）的相对量，用质量百分数表示。

（15）液膜厚度（liquid film thickness） 在载体表面或柱管内壁上涂布的固定液厚度。

（16）涂渍效率（coating efficiency） 最小理论板高与理论板高的百分比。表征空心柱柱效达到理想化的程度。

（17）柱流失（colum bleeding） 固定液随载气流出柱外的现象。

（18）柱寿命（column life） 色谱柱能在良好分离状态下使用的极限时间。

（19）老化（conditioning） 将色谱柱用通载气和加温（高于操作温度，低于固定液最高使用温度）处理使其性能稳定的过程。

（20）脱活（deactivating） 使物质丧失活性称为脱活。

（21）柱容量（column capacity） 又称柱负荷（column load）。分析用色谱柱的柱容量是不引起色谱峰伸前和柱效下降情况下的最大进样量；制备色谱柱的柱容量是指不影响收集物纯度前提下的最大进样量。

七、检 测 器

（1）检测器（detector） 能检测色谱柱流出组分及其量的变化的器件。

（2）热导检测器（thermal conductivity detector，TCD） 当载气和色谱柱流出物通过热敏元件时，由于两者的热导系数不同，使阻值发生差异而产生电信号的器件。

（3）氢火焰离子化检测器（hydrogen flame ionization detector，FID） 能使通入的有机物在氢火焰中燃烧生成离子并在电场作用下产生电信号的器件。

（4）氮磷检测器（nitrogen phosphorous detector，NPD） 一种火焰离子化检测器，在其喷嘴附近放置了碱金属化合物，能增加含氮或含磷化合物所生成的离子，从而使电信号增强。

（5）火焰光度检测器（flame photometaric detector，FPD） 将含硫或含磷化合物在富氢火焰中产生的特征波长的光转化为电信号的器件。

（6）电子俘获检测器（electron capture detector，ECD） 使载气分子在^{3}H或^{63}Ni等辐射源所产生的β粒子的作用下离子化，在电场中形成稳定的基流，当含电负性基团的组分通过时，俘获电子使基流减小而产生电信号的器件。

（7）光离子化检测器（photoionization detector，PID） 利用高能量的紫外线使电离电位低于紫外线能量的组分离子化，在电场作用下产生电信号的器件。

（8）微波等离子体（发射光谱）检测器（microwave plasma（emission spectrometric）detector） 用微波等离子体激发化合物，使所含元素产生特征发射光谱，经分光系统能同时检测多种元素的器件。

（9）积分型检测器（integral detector） 响应值取决于组分累积量的检测器。

（10）微分型检测器（differential detector） 响应值取决于组分瞬时量的检测器。

（11）浓度敏感型检测器（concentration sensitive detector） 响应值取决于组分浓度的检测器。

（12）质量（流量）敏感型检测器（mass（flow rate）sensitive detector） 响应值取决于组分质量流量的检测器。

（13）基线（baseline） 在正常操作条件下，仅有载气通过检测器系统时所产生的响应信号曲线。

（14）基线漂移（baseline drift） 基线随时间定向的缓慢的变化。

（15）基线噪声（baseline noise） 由于各种因素所引起的基线波动。

（16）灵敏度（sensitivity） 物质通过检测器时，物质量变化ΔQ时信号量的变化率，称为检测器对该物质的灵敏度（S）。

$$S=\frac{\Delta R}{\Delta Q}$$

式中R的单位为mV，Q的单位则因检测器的类型不同而异，S的单位随之亦有不同。

①浓度型检测器：当Q的单位定义为每1ml载气中所含组分的体积（ml）时，则有S_v，其单位为$mV \cdot ml \cdot ml^{-1}$。当$Q$的单位定义为每1ml载气中所含组分的质量（mg）时，则有S_g，其单位为$mV \cdot ml \cdot mg^{-1}$。

②质量型检测器：当Q的单位定义为每1s所通过的组分的质量（g）时，则有S_t，其单位为$mV \cdot s \cdot g^{-1}$。它们之间的关系，可用下式表示。

$$S_g=S_v \cdot \frac{22.4}{M}=S_t \cdot \frac{F_d}{60\times 1000}$$

式中，F_d为检测器温度和大气压力下载气的流量，单位为$ml \cdot min^{-1}$。

（17）信噪比（signal-to-noise ratio） 响应信号与噪声的比值。

（18）响应值（response） 组分通过检测器所产生信号的量。

（19）相对响应值（relative response） 单位量物质与单位量参比物质（基准物）的响应值之比。

$$s_m=\frac{A_i/m_i}{A_{st}/m_{st}} \qquad s_v=\frac{A_i/V_i}{A_{st}/V_{st}}$$

（20）线性范围（linear range） 检测器响应信号与被测物质的量呈线性关系的范围。

（21）检测限（detectability） 随单位体积的载气或在单位时间内进入检测器的组分所产生的信号等于基线噪声 2 倍时的量。

（22）最小检测量（minimum detectable quantity） 组分能产生 2 倍噪声信号的量为检测器对该组分的最小检测量。

（23）最小检测浓度（minimum detectable concentration） 最小检测量和进样量的比值。

（24）响应时间（response time） 以一定浓度的试样连续通过检测器，得到一个稳定的信号，当试样浓度突然转变，输出信号达到新平衡条件的 63％时所需的时间为检测器的响应时间。即指进入检测器的组分输出达到 63％所需的时间。

八、定　性

（1）保留时间（retention time） 进样后组分流入检测器的浓度达到最大值的时间，即组分从进样到出现峰最大值所需的时间，称为该组分的保留时间（t_R）。

（2）死时间（dead time） 不被固定相滞留的物质的保留时间称为死时间（t_M）。

（3）调整保留时间（adjusted retention time） 柱温恒定时，组分保留时间减去死时间后的值称为该组分的调整保留时间。

$$t'_R = t_R - t_M$$

（4）校正保留时间（corrected retention time） 柱温恒定时，组分的用压力梯度校正因子修正的保留时间。

$$t^0_R = jt_R$$

（5）净保留时间（net retention time） 组分的用压力梯度校正因子修正的调整保留时间。

$$t_N = jt'_R$$

（6）保留体积（retention volume） 柱温恒定时，组分从进样到出现峰最大值所需的载气体积，称为该组分的保留体积。

$$V_R = t_R \cdot F_C$$

（7）死体积（dead volume） 不被固定相滞留的物质的保留体积称为死体积。

$$V_M = t_M \cdot F_C$$

（8）调整保留体积（adjusted retention volume） 组分保留体积减去死体积后的值称为该组分的调整保留体积。

$$V'_R = V_R - V_M$$

（9）校正保留体积（corrected retention volume） 组分的用压力梯度校正因子修正的保留体积。

$$V^0_R = jV_R$$

（10）净保留体积（net retention volume） 组分的用压力梯度校正因子修正的调整保留体积。

$$V_N = jV'_R$$

（11）比保留体积（specific retention volume） 组分在每克固定液校正到 273.16K 时的净保留体积。

$$V_g = \frac{273.16V_N}{m_L T_C}$$

（12）相对保留值（relative retention value） 在相同操作条件下，组分与参比物质的调整

保留值之比。

$$r=\frac{t'_{R_i}}{t'_{R(st)}}=\frac{V'_{R_i}}{V'_{R(st)}}=\frac{V_{gi}}{V_{g(st)}}=\frac{k_i}{k_{st}}$$

(13) 保留指数 (retention index)　恒温操作下组分的一种定性指标。通常以色谱图上位于组分两侧的相邻正构烷烃的保留值为基准，用对数内插法求得。而每个正构烷烃的保留指数规定为其碳原子数乘以100。

$$I=100\left[Z+\frac{\lg X_i-\lg X_z}{\lg X_{(z+1)}-\lg X_z}\right]$$

(14) 保留温度 (retention temperature)　组分从进样到出现峰最大值时的柱温，称为该组分的保留温度。当柱温为线性程序升温时，则有

$$T_R=T_i+R_h t_R$$

(15) 线性程序升温保留指数 (linear retention index)　组分的线性程序升温保留指数的定义如下式所示。

$$I^T=100\left[Z+\frac{X_R-X_z}{X_{(z+1)}-X_z}\right]$$

(式中 X 是相应物质的保留温度、容量因子或类似恒温时的调整保留时间、净保留体积。)

(16) 保留值规律 (retention rule)　指气液色谱法组分的保留值与一些参数之间有某种经验关系 (这些规律可用于组分定性)。如同系物组分碳数规律、沸点规律和双柱规律等。

(17) Antoine 方程式 (Antoine eqnation)　表征组分保留值与柱温关系的经验式。

$$\lg V_g=A+\frac{B}{t_c+C}$$

上式当常数 $C=273.16$ 时，就成为下式。

$$\lg V_g=-\frac{\Delta H_s}{2.30RT_c}+A_1$$

(18) 保留值定性法 (retention method for identification)　将组分的保留值与已知物质在相同操作条件下测得的保留值相比较，如果数值在实验容许误差范围内，则此组分可能是该物质，否则就不是该物质。

(19) 检测器定性法 (detector method for identification)　指利用选择性检测器对组分检测信号的不同对其作出判定的方法和用特定检测器 (如 MS) 进行组分定性的方法。

(20) 化学试剂定性法 (chemical reagent method for identification)　用物理或化学的消除剂将样品中某类化合物消除、减少或转移，从而得知样品中有含这类官能团的化合物的方法。

(21) 反应定性法 (reaction method for identification)　测定样品经过反应后的组分，从而推断母体组分的定性方法。

(22) 热解产物定性法 (pyrolyzate method for identification)　将固体聚合物在一定条件下热解成易挥发、相对分子质量较小的组分后，进行色谱分析，推断该聚合物的定性方法。

九、定　　量

(1) 峰高定量法 (peak height method)　用色谱峰峰高值进行定量的方法。

(2) 峰面积定量法 (peak area method)　用色谱峰面积值进行定量的方法。

(3) 归一化定量法 (normalization method)　将样品中所有组分含量之和定为100%，计算其中某一组分含量百分数的定量方法。组分各自的峰值要用相应的相对定量校正因子校准。

峰值为峰面积时则组分 i 的百分含量为

$$x_i=\frac{f_iA_i}{\sum f_iA_i}\times100\%$$

（4）面积归一化定量法（area normalization method）　按上述归一化定量法进行定量时，若各组分所用的相对定量校正因子的值接近相等，则称为面积归一化法，即组分 i 的百分含量为

$$x_i=\frac{A_i}{\sum A_i}\times100\%$$

（5）内标定量法（internal standard method）　先向已知质量为 m 的样品中，加入质量为 m_s 的被称为内标物的物质 s，然后进行色谱分析。利用此内标物 s 对组分的峰值比来定量的方法称为内标定量法。峰值为峰面积时组分 i 的百分含量为

$$x_i=\frac{m_s}{m}\cdot\frac{f_iA_i}{f_sA_s}\times100\%$$

式中，f_i 和 f_s 分别是组分 i 和内标物 s 的相对校正因子。

（6）叠加定量法（addition method）　对样品进行色谱分析时，一份直接进样，另一份按内标定量法进行色谱分析，但加入的内标物是样品组分之一（称为叠加物），利用未加和加有叠加物的色谱图进行定量。

（7）外标定量法（external standard method）　在相同的操作条件下，分别将等量的试样和含待测组分的标准样进行色谱分析，比较两者中待测组分的峰值，求出待测组分含量的方法。峰值用峰面积时，若标准样中组分 i 的含量为 E_i，得到其峰面积为 A_E，则试样中组分 i 的峰面积为 A_i 时，试样中组分 i 的含量 x_i 为

$$x_i=E_i\cdot\frac{A_i}{A_E}$$

（8）定量校正因子（correction factor）　进入检测器中组分的量与检测器产生的相应峰值的比值。组分的量和峰值分别用质量和峰面积时，有

$$f'_m=m_i/A_i$$

（9）相对（定量）校正因子（relative correction factor）　组分定量校正因子与基准物定量校正因子的比值称为该物质的相对（定量）校正因子。物质分别以质量、体积及物质的量（mol）表示时，分别有相对质量校正因子（f_m）、相对体积校正因子（f_v）、相对摩尔校正因子（f_M）。例如峰值用峰面积的相对质量校正因子的表达式为

$$f_m=\frac{m_i/A_i}{m_{st}/A_{st}}$$

相对（定量）校正因子与相对响应值互为倒数关系。

十、温　　度

（1）柱温（column temperature）　色谱分析时色谱柱的温度。由于色谱柱被置于色谱炉内加热，故炉温即为柱温。

（2）恒温（isothermal temperature）　进行色谱分析时，柱温保持不变。

（3）程序升温（programmed temperature）　进行色谱分析时，开始的柱温低，终止时的柱温高，称为程序升温。柱温由开始至终止期间，升温速度无变化的为线性程序升温，否则为非线性程序升温或多阶程序升温。

(4) 气化温度 (vaporization temperature)　为了使液体样品气化，气化室被设置的温度，故亦是气化室温度。

(5) 检测器温度 (detector temperature)　为了便于检测组分，检测器被设置的温度。

十一、色 谱 分 离

(1) 分配等温线 (distribution isotherm)　指在一定温度下，达到平衡时组分在固定相中的浓度对流动相中浓度作图所得的曲线。如固定相为吸附剂时，即称为吸附等温线。分配等温线一般有三种形式，其一为直线型，表明组分在两相间的分配与其浓度无关，色谱分离过程时，色谱峰呈对称状；其二为凸线型（即 Langmuir 等温线），浓度大的区域较浓度小的区域移动快，故色谱峰是拖尾峰；其三是凹线型（即 Freundlich 等温线），与凸线型相反，色谱峰是前伸峰。

(2) 分配系数 (partition coefficient)　指在一定温度下，平衡状态时组分在固定相和流动相中浓度的比。对于气液色谱法，分配系数为

$$K=\frac{\text{每毫升固定液中所溶解的组分量}}{\text{柱温及柱平均压力下每毫升载气所含组分量}}=\frac{c_L}{c_G}$$

(3) 容量因子 (capacity factor)　又称分配比、容量比、分配容量、保留因子，指组分在固定相和流动相中分配量（质量、体积、物质的量）之比。

$$k=\frac{\text{组分在固定相中的量}}{\text{组分在流动相中的量}}$$

与其他色谱参数有以下一些关系：

$$k=K\frac{V_L}{V_G}=\frac{K}{\beta}=\frac{t'_R}{t_M}$$

(4) 相比率 (phase ratio)　色谱柱内气相与吸附剂或固定液体积之比。如对于气液色谱法

$$\beta=\frac{V_G}{V_L}$$

(5) 谱带 (band)　样品各组分在色谱柱内所形成的浓度分布。

(6) 谱带扩张 (band broadening)　由于纵向扩散、传质阻力等因素的影响，使组分在色谱柱内移动过程中谱带宽度增加的现象。

(7) 分离度 (resolution)　两个相邻色谱峰的分离程度，以此两个组分保留值之差与其平均峰宽值之比表示：

$$R_s=\frac{2(t_{R2}-t_{R1})}{(w_{b1}+w_{b2})}$$

(8) 分离数 (separation number)　两个相邻的正构烷烃峰之间可容纳的峰数。

$$SN=\frac{t_{R(Z+1)}-t_{RZ}}{w_{hZ}+w_{h(Z+1)}}-1$$

十二、柱 效 能

(1) 柱效能 (column efficiency)　色谱柱在色谱分离过程中主要由动力学因素（操作参数）所决定的分离效能。通常可由测定柱的板数、分离度、分离数、涂渍效率等得知。

(2) 板数 (plate number)　用一个组分洗脱情况考察柱效能，并以其保留时间（保留体

积）与峰宽按下式计算的数据来表征。

$$N=5.545\left(\frac{t_R}{w_h}\right)^2$$

（3）有效板数（effective plate number） 用一个组分洗脱情况考察柱效能，并以其调整保留时间（调整保留体积）与峰宽按下式计算的数据来表征。

$$N_{eff}=5.545\left(\frac{t'_R}{w_h}\right)^2$$

（4）板高（plate height） 单位板的长度。

$$H=\frac{L}{N}$$

（5）有效板高（effective plate height） 单位有效板的长度。

$$H_{eff}=\frac{L}{N_{eff}}$$

（6）平衡色谱理论（equilibrium chromatographic theory） 这是最早解释色谱过程的理论，它假设在整个色谱过程中，组分在流动相和固定相之间可瞬时达到分配平衡，及浓度差引起的扩散效应可以忽略不计。根据此假设和物料平衡原理，可写出在色谱柱中 Δx 单元内，组分运动的微分方程式，解此方程式后，得到一些描述区域移动的结论。如色谱谱带移动速度，即组分保留时间取决于组分的分配系数，欲两物质能分离，必需其分配系数有差异。也解释了不同分配等温线的形状与色谱峰形状的关系。

平衡色谱理论认为色谱过程中谱带宽度不展宽与事实不符，这促使色谱理论继续向前发展。

（7）塔板理论（plate theory） 塔板理论建立在平衡色谱理论的基础上，把色谱过程比拟为蒸馏过程，即：色谱柱是由一系列相同的塔板组成；流动相以跳跃方式前进到次一塔板，把全部集中在第一个塔板的样品沿色谱柱洗脱；组分在每个塔板可瞬时达到平衡；设流动相不可压缩和物质的分配系数不随浓度变化。推导出当板数很大时，组分在柱内的浓度分布可用正态分布曲线方程表示。这样用塔板理论既可解释色谱谱带移动速度，又可解释移动时谱带宽度会展宽这个事实，以及柱长和板高的影响；但未能回答操作条件对板高有哪些影响。

（8）速率理论（rate theory） 速率理论认为色谱过程中，组分在流动相和固定相之间的平衡不能瞬间达成（即传质速率不是无限大），沿色谱柱流动的方向有纵向扩散效应，阐述了板高受哪些操作条件影响，推导出如 van Deemter 方程式和 Golay 方程式，描述色谱动力学。

（9）van Deemter 方程式（van Deemter equation） 此方程式是用速率理论描述填充柱板高受哪些操作条件影响的重要公式。现在公认的（修正的）van Deemter 方程式为

$$H=2\lambda d_p+\frac{2rD_G}{\bar{u}}+\left[\frac{0.01k^2}{(1+k)^2}\cdot\frac{d_p^2}{D_G}+\frac{2k}{3(1+k)^2}\cdot\frac{d_f^2}{D_L}\right]\bar{u}$$

等式右边第一项为涡流扩散项，是指载气碰到色谱柱中填充物颗粒时，不断改变流动方向，使组分分子在气相中形成类似“涡流”的紊乱流动。故载体直径愈小，填充越均匀（λ 越小），则此项就越小。第二项为分子扩散项，由于组分在柱内存在着浓度梯度，形成纵（轴）向扩散使谱带展宽，故与组分在载气中的扩散系数和在气相中滞留时间（载气流速小）成正比。第三项为气相传质阻力和液相传质阻力。前者是指分子从气相到气液界面进行交换时的阻力；后者是指分子由气液界面扩散到液相达到平衡和返回的阻力。故 H 值与载气性质、流速、固定液性质及用量、柱温有关。

（10）Golay 方程式（Golay equation） 此方程式是用速率理论描述涂壁空心柱板高受哪些操作条件影响的重要公式。Golay 方程式可写为

$$H=\frac{2D_G}{\bar{u}}+\frac{1+6k+11k^2}{24(1+k)^2}\cdot\frac{r_c^2}{D_G}\bar{u}+\frac{2k}{3(1+k)^2}\cdot\frac{d_f^2}{D_L}\bar{u}$$

等式右边第一项是分子扩散项，第二项是气相传质阻力项，第三项是液相传质阻力项。其意义请参见前述的 van Deemter 方程式。由于涂壁空心柱内不填充载体，故没有涡流扩散项（$\lambda=0$）；分子扩散项中，没有气体扩散路径弯曲因子（$\gamma=1$）；气相传质阻力项中，柱内半径 r_c 代替了载体粒度 d_p；液相传质阻力项，则与 van Deemter 方程式相同。

（11）柱外效应（extra-column effect） 指气化室至检测器之间的气流系统，除色谱柱外各种因素对柱效能所产生的影响。

（12）流出曲线方程式（equation of elution curve） 指可用以描述流出曲线的方程式。从不同的色谱理论可得到不同的流出曲线方程式。

十三、其　他

（1）进样器（sample injector） 能定量和瞬时地将样品加入色谱系统的器件，通常指注射器或进样阀。

（2）气化室（vaporizer） 使样品瞬时气化及预热载气的部件。

（3）分流器（splitter） 按一定比例将气流分成数部分的部件。

（4）记录器（recorder） 记录由检测系统所产生的随时间变化的电信号仪器。

（5）积分仪（integrator） 按时间累积检测系统所产生电信号的仪器。

（6）分流比（split ratio） 样品在气化室中完全气化并与载气充分混合后，一部分进入色谱柱，其余部分放空，这两部分载气量比值称为分流比。

（7）操作条件（operational condition） 进行色谱分析时，所选用的色谱柱及柱温；检测器及其温度；载气、其他气体及流速；样品处理、进样量和方式等实验条件。

（8）洗脱（elution） 载气携带组分在色谱柱内向前移动并流出色谱柱的过程。

（9）反吹（backflushing） 一些组分被洗脱后，将载气反向通过色谱柱，使尚未被洗脱的另一些组分向相反方向移动的操作。

（10）柱切换（column switching） 改变载气流动方向，使进入另一色谱柱的样品组分进行色谱分离等操作。

参 考 文 献

1 Stahl E. Chromatographia, 1968; 1: 338
2 GB 4946-85
3 战英民. 英汉色谱技术词汇. 第二版. 北京：科学出版社，1982
4 李浩春. 色谱，1988；6：183
5 Rotzsch H. Stationary Phases in Gas Chromatography. New York: Elsevier, 1991
6 李浩春，卢佩章. 气相色谱法. 北京：科学出版社，1993
7 Pure Apply Chem. 1993; 65: 819
8 Ettre L S. Chroamtographia, 1994; 38: 521

（杨　黎）

第三章　气相色谱仪

第一节　概　　述

生产和科学技术的发展，尤其是生命科学和环境科学的发展，要求科学仪器能提供更多、更全面的信息，这就推动了现代仪器惊人的长足发展[1]，其中气相色谱仪的发展特别令人瞩目[2~7]。第五届北京分析测试学术报告会及展览会上，有人曾对仪器拥有情况及购买意向进行调查，结果见表3-1，表3-2[8]。

表3-1　仪器拥有状况统计表

拥有仪器名称	拥有率①/%	拥有仪器名称	拥有率①/%	拥有仪器名称	拥有率①/%
气相色谱仪	58.2	质谱仪	20.2	电感耦合等离子体发射光谱仪	14.5
原子吸收分光光度计	56.2	X射线能谱仪	18.4	差热分析仪	14.2
紫外分光光度计	50.4	元素分析仪	17.8	核磁共振仪	14.5
高效液相色谱仪	47.2	透射电镜	15.8	X射线荧光光谱仪	12.8
扫描电镜	25.5	X射线衍射仪	14.8	自动滴定仪	11.6
荧光分光光度计	23.4	离子色谱仪	14.8		
傅里叶红外光谱仪	22.8				

①拥有率（%），系指拥有该仪器的单位占总取样单位的百分比。

表3-2　仪器购买意向统计表

仪器名称	所占分数①/%	仪器名称	所占分数①/%	仪器名称	所占分数①/%
傅里叶红外光谱仪	8	原子吸收分光光度计	4.4	X射线能谱仪	2.9
气相色谱仪	7.3			荧光分光光度计	2.5
紫外分光光度计	6.6	毛细管电泳	4.0	元素分析仪	2.5
电感耦合等离子体发射光谱仪	6.6	扫描电镜	3.6	差热分析仪	2.5
		X射线荧光光谱仪	3.6	透射电镜	2.2
质谱仪	6.2	图象分析仪	3.6	离子色谱仪	2.2
高效液相色谱仪	5.8				

①所占分数（%），系指欲购该仪器台数在欲购总台数中所占的百分比。

表3-1，表3-2显示出在18种常见分析仪器中，拥有气相色谱仪的单位居首位。从今后购买趋向判断，气相色谱仪也倍受垂青。这是由于气相色谱仪具有其他分析仪器不可比拟的高分离性能。

自从1954年Perkin-Elmer公司率先推出了全世界第一台商品气相色谱仪以来，气相色谱仪无论在数量上还是品质上都得到高度的发展。目前的发展主要集中在开发智能软件，提高自动化程度和自检故障的能力；增强数据处理功能及与其他谱仪联用的技术[4]；小型化、专用机化等方面。各种气相色谱仪都包括五个基本部分（单元），如图3-1所示。

各单元功能如下：

①气流系统　携带试样通过色谱柱，提供试样在柱内运行的动力。

②进样系统　引入试样，并使试样瞬间气化。

③柱系统　试样在柱内运行的同时得到所需要的分离。

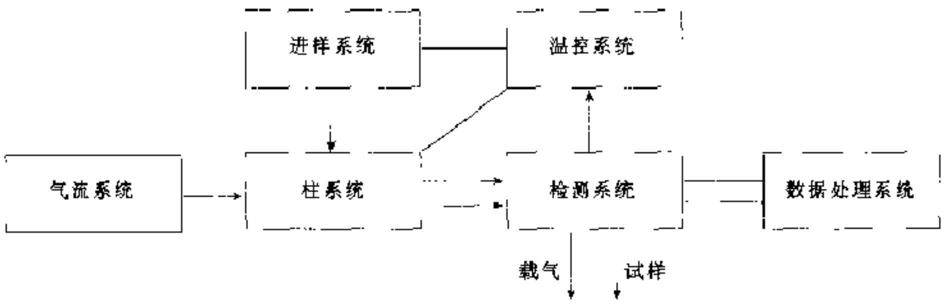


图 3-1　气相色谱仪基本单元

④检测系统　对柱后已被分离的组分进行检测。

⑤数据处理系统　记录并处理由检测器输入的信号，给出试样定性、定量的结果。

⑥温控系统　控制并显示气化室、色谱柱柱箱、检测器及辅助部分的温度。

各单元的组成部件及功能见表 3-3；气相色谱仪的流程见图 3-2。

表 3-3　气相色谱仪各部件功能

单元	部件名称	功　　　能
气流系统	气　源	高压钢瓶或气体发生器，提供载气气源
	净化器	装有分子筛、活性炭等吸附剂或催化剂，用于净化载气
	稳压阀	稳定柱进口压力
	稳流阀	调节并稳定气体流量
	压力计	显示柱进口处压力
	流量计	指示载气流量，一般用转子流量计指示柱前载气流速，用皂膜流量计测量柱后载气流量
进样系统	进样器	引入试样，一般采用微量注射器，六通阀或自动进样器
	气化室	使液态试样瞬间气化，一般采用电加热；附有温度控制装置
柱系统	色谱柱	分离试样的核心部件，有不锈钢（或玻璃）填充柱和石英毛细管柱两种，装在有温度控制装置的色谱柱柱箱内
检测系统	检测器	将柱后各组分浓度变化转化成电信号，附有温度控制装置
	放大器	将检测器输出的电信号放大后输入数据处理系统
数据处理系统	记录仪	记录放大器输出的电信号，即绘出色谱图
	数据处理系统	用于仪器控制、信号控制、峰的解析、数据采集和处理、信息管理和贮存等，如积分仪、计算机、打字机等装置
温控系统	温控器	控制气化室、柱箱及检测器的温度，有恒温和程序升温两种，一般附带过温保护装置

气相色谱仪根据其功能不同，可以分成诸多不同的类型，以下将简略介绍。表 3-4 和表 3-5 给出国内外一些厂家和气相色谱仪的一般情况[6]。

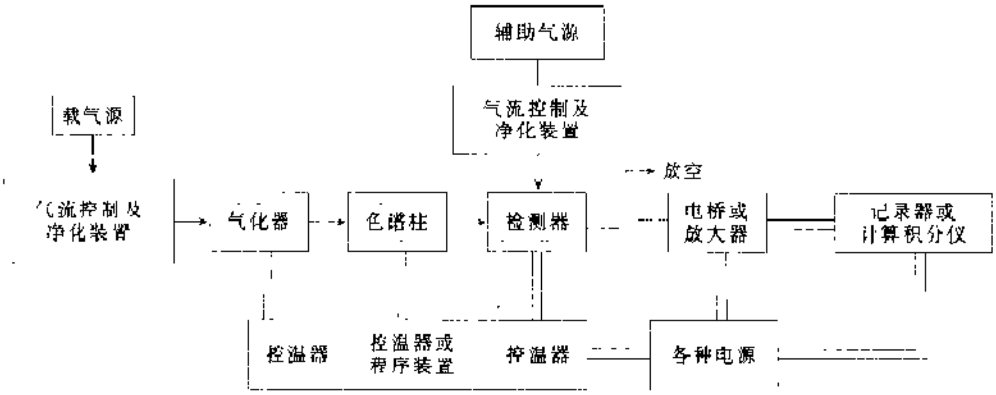


图 3-2　气相色谱仪典型流程和部件

表 3-4　国外气相色谱仪主要厂家、厂商及其商品一览表[6]

表中数字代表的意义：

1　流程色谱；
2　还原气体检测器；
3　框架式 GC；
4　氦离子化检测器；
5　应用 GC 系统；
6　气液联用色谱；
7　便携式气体分析仪；
8　多维系统；
9　放电离子化检测器；
10　连续监控仪；
11　Ar (O_2，He) 高频放电检测器；
12　GC 外围设备，气体处理装置；
13　逆流色谱；
14　大气和环境检测仪；
15　GC 制备系统；
16　Hall 电导检测器；
17　野外 GC 分析仪；
18　超临界流体色谱；
19　热气体、质量流量控制仪；
20　HALL、ELCD、DID 检测器；
21　特殊系统；
22　氮离子化检测器；
23　热脱附、膜式分离式 GC/MS；
24　流程色谱（指定设计）；
25　自动采样（液/气）。

GC 仪器厂家和厂商	色谱柱		色谱仪				自动进样	检测器									其他 GC 设备								
	毛细管	填充柱	分析	制冷	制备	其他		ECD	FID	FPD	IR	MS	NPD	PID	TCD	其他	自动采样	液缩	气体净化	热裂解	载体和固定相	分流	程序升温	阀、表、过滤器	其他
ABB Process Analytics			•																						
AI Cambridge Ltd			•					•	•	•			•		•		•								•
American Bioanalytical	•	•	•		•												•							•	
Analrol Ltd			•			1																			
The Anspec Co，Inc	•	•	•					•	•	•			•	•	•				•		•	•		•	
Antek Instruments，Inc	•	•	•	•		3		•	•	•					•		•							•	5
Applied Automation						1																			
Arnel，Inc			•			1																			5
CARLE/EG－G Chandler		•	•						•						•									•	•
CDS Analytical			•															•		•					
Celite Corporation			•		•	6																			
Chrompack，Inc	•	•	•				•		•	•			•		•		•		•		•	•	•	•	•
Chrompack International BV	•	•	•			7	•										•	•	•		•	•		•	•
DANI Strumentazione Analitica，SpA			•	•		1	•	•	•	•			•	•	•		•	•	•					•	8
EC&G Chandler Engineering/Carle Chromatography		•	•						•						•									•	
ES Industries			•				•	•	•	•			•	•	•		•					•		•	8
Fisons Instruments			•				•	•	•	•		•	•	•	•	•									
Fluid Management Systems，Inc			•		•																				

续表

GC仪器厂家和厂商	色谱柱：毛细管	色谱柱：填充柱	色谱仪：分析	色谱仪：制冷	色谱仪：制备	色谱仪：其他	自动进样	检测器：ECD	检测器：FID	检测器：FPD	检测器：IR	检测器：MS	检测器：NPD	检测器：PID	检测器：TCD	检测器：其他	其他GC设备：自动采样	其他GC设备：浓缩	其他GC设备：气体净化	其他GC设备：热裂解	其他GC设备：载体和固定相	其他GC设备：分流	其他GC设备：程序升温	其他GC设备：阀，表，过滤器	其他GC设备：其他
Gow Mao Instrument Co			•						•				•		•	9									
Hewlett Packard Co	•	•	•						•	•	•	•	•	•	•	•	•		•			•		•	
HNU Systems，Inc	•		•			10								•											
Houston Atlas			•				•													•					
Jones Chromatography Ltd	•	•	•		•		•														•	•			
Lagus Applied Technology		•				10		•																	
LINC Quantum Analytics			•					•	•		•	•		•			•								
Mikrolab Aarhus A/S			•						•						•				•						
OI Analytical							•		•					•		14	•	•							
Orthodyne SA		•	•			1									•	11							•	•	12
PC Ins.					•	13																			
The Perkin Elmer Corporation	•	•	•	•			•	•	•	•	•	•	•	•	•		•	•	•	•	•	•	•	•	8
Photovac International，Inc						14																			
Process Analyzers，Inc			•						•	•				•	•		•								
Prochrom，Inc					•																				15
Prolabo，Inc	•		•				•	•	•	•			•		•		•		•	•				•	
Sci-Con	•	•	•		•		•	•	•	•				•	•		•		•	•	•	•	•	•	8
Separex					•																				
Shimadzu Scientific Insstruments，Inc	•	•	•	•			•	•	•	•		•	•	•	•	16	•	•	•	•	•	•	•	•	8
Siemans AG			•			1	•	•	•	•			•		•	11						•		•	8
Sigma Instruments	•	•	•						•				•		•				•		•	•	•	•	8
Southland Cryogenics Inc				•															•				•	•	
SRI Instruments			•			17	•	•	•	•			•	•	•	15		•				•	•	•	8
Suprex Corp						18			•																
Teledyne Hastings-Raydist						19																			
Thames Chromatography		•															•		•					•	
Tremetres Inc.			•					•	•	•			•	•	•	20									
Unicam Analytical Systems		•	•	•			•	•	•	•	•	•	•	•	•		•		•			•			21
Valco Instruments								•							•	4			•				•	•	
Varex Corp					•																				
Varian Analytical Instruments	•	•	•				•	•	•	•		•	•	•	•	22	•						•	•	8
Viking Instruments			•			17		•	•	•		•	•	•	•			•							23
Wasson-Ece Instrumentation		•				24																			25
Zymark Corp			•																						

表 3-5 国内常用的气相色谱仪一览表

厂 家	仪器型号	性能与特点	主要技术指标	仪器成套性	适用范围
北京分析仪器厂	SQ 203 型气相色谱仪	有四种检测器（TCD、FID、ECD、FPD）可供选择；微机控制、键盘输入、人机对话；双流路补偿气路；多阶全自动程序升温控制	TCD：S_g>5000（苯） FID：D_t（恒温）≤3×10⁻¹¹（程序升温）≤5×10⁻¹⁰（苯） ECD：D_t≤5×10⁻¹²（γ-666） FPD：D_t 测硫≤1×10⁻¹⁰（噻吩） 测磷≤1×10⁻¹⁰（1065）	基本配置：主机配 TCD、FID 检测器 ECD 和 FPD 检测器及其他选件可根据需要选配	科研和大、中企事业单位作常量、微量和痕量分析用
北京分析仪器厂	SQ 204 型气相色谱仪	立式柱箱，配 FID 检测器，整体结构灵活，根据特殊需要可改装成专用分析仪器	FID：D_t≤2×10⁻¹¹（苯）	主机、温度控制器、FID 放大器 可选附件：记录仪、数据处理机、程序升温控制器、毛细管分析装置、甲烷转化装置、除烃装置、吸解附浓缩装置	适合于沸点低于 350 ℃的有机化合物的常量、微量和痕量分析
北京分析仪器厂	SQ 206 型气相色谱仪	除增加了 TCD 热导检测器外，其他均与 SQ 204 型相同	TCD：S_g≥1500（苯）	在 SQ-204 型基础上增加一个 TCD 检测器及气体进样六通阀；可选附件同 SQ-204	一般要求的实验室进行常数、微量和痕量分析
北京分析仪器厂	SQ-207 型气相色谱仪	立式柱箱，结构简单，操作方便，价格低廉，专门配（ECD）电子捕获检测器（⁶³Ni），柱头进样器，不锈钢柱（也可选玻璃柱）	ECD：D_t≤4×10⁻¹⁸（γ-666）	主机、温度控制器、ECD 检测用放大器	适用于卫生防疫、环境检测、食品等领域电负性有害物质的分析测试
北京分析仪器厂	SQ-208 型气相色谱仪	立式柱箱，结构简单，操作方便，价格低廉，专门配 FID、FPD 检测器	FID：D_t≤2×10⁻¹¹（苯） FPD：D_t 测硫≤1×10⁻¹¹（噻吩） 测磷≤1×10⁻¹⁰（甲基对硫磷）	主机、温度控制器、FID 和 FPD 检测用放大器部件；可选附件同 SQ-204 型仪器	适用于卫生防疫、环境检测等领域分析碳氢化合物、有机磷、有机硫
北京分析仪器厂	SP-3400 型气相色谱仪	该仪器是引进美国 Varian 公司技术生产，具有自诊断功能；微处理机控制、全键盘操作，可存储四种分析方法、四阶程序升温，五种检测器可供选择（TCD、FID、ECD、FPD、TSD），填充柱配柱头注样器，毛细管柱配分流/不分流注样器	TCD：S_g≤1.8×10⁻⁶ mg·ml（He 中的 n-C_{16}） FID：D_t≤5×10⁻¹²（n-C_{16}） ECD：最小检测量 m_{min}≤1×10⁻¹³g（六氯化苯） FPD：D_t(S)≤1×10⁻¹²（甲基对硫磷） D_t(P)≤1×10⁻¹²（甲基对硫磷）	主机、进样器、检测器 其他可选部件有：毛细管装置、记录仪、数据处理机、及备件等 注：主机除 TCD 外，还可同时安装其他两种检测器	科研院所和工矿企业的中心实验室作多科性精密分析
北京分析仪器厂	SP-3410 型气相色谱仪	该仪器引进、消化、吸收美国 Varian 公司技术生产，其特点与 SP 3400 型相同	同 SP-3400 型仪器	同 SP-3400 型仪器	同 SP 3400 型仪器

续表

厂家	仪器型号	性能与特点	主要技术指标	仪器成套性	适用范围
北京分析仪器厂上海分厂	SP-3420 型气相色谱仪	同 SP-3400 型仪器	TCD: $S_g \leq 9\times10^{-6}$(He 中的 n C_{16}) FID: $D_t \leq 8\times10^{-12}$(n C_{16})	同 SP-3400 型仪器	同 SP-3400 型仪器
北京分析仪器厂	SP-3430 型气相色谱仪	该仪器是在 GC3400 型的基础上研制的专用色谱仪，它保留了 GC3400 型电器的全部功能，采用多维柱切换系统，能自动完成阀的驱动和两个检测器信号的切换，从而实现对 H_2、N_2、O_2、CO、CO_2、CH_4、C_2H_2、C_2H_4、C_2H_6 等组分的一次进样全自动分析，通过甲烷转化装置将 CO、CO_2 转化成甲烷，可检测微量的 CO、CO_2	TCD: $S_g>5000$(苯) FID: D_t(恒温)$\leq 8\times10^{-12}$(n-C_{16}) 对 H_2 的最小检测浓度$\leq 10\times10^{-6}$；对 CO、CO_2 的最小检测浓度$\leq 1\times10^{-6}$；对 C_2H_2 的最小检测浓度$\leq 0.5\times10^{-6}$	主机配 TCD、FID 检测，甲烷转化装置、专用色谱柱及备件；用户也可根据使用要求选订二次进样或一次进样分流结构仪器	广泛应用于电力系统充油设备用油中溶解气的分析，还可用于环保、医药、化工、煤矿等部门测定微量的 CO、CO_2
北京分析仪器厂	SP-3700 型气相色谱仪	该仪器是引进美国 Varian 公司技术生产，五种检测器（TCD、FID、ECD、FPD、TSD）可供选择，柱箱可同时装四根填充柱（或两根填充柱与一根毛细管柱），通用的离子化检测器基座，可方便地互换 FID、TSD、FPD 和 ECD 检测器；可连续诊断并显示仪器全部的实际状态，并具有单阶数字式自动线性程序升温，通用的进样器箱，最多可同时安装四个注样器	同 SP-3400 型仪器	同 SP-3400 型仪器	科研院所和工矿企业的中心实验室作多科性精密分析用
北京分析仪器厂	SP-3600 型气相色谱仪	集 SP-3400 的电器和 SP-3700 的柱箱及注样器之所长而制造生产	同 SP-3400 型仪器	同 SP-3400 型仪器	同 SP-3700 型仪器
北京分析仪器厂上海分厂	GC-9002 型气相色谱仪	紧凑的嵌装式结构、标准零部件、便于互换、组合、升级和扩展；操作简单、处理能力强，精确度高；四种检测器（TCD、FID、ECD、FPD）可供用户选择	TCD: $S_g>2500$(正辛烷中正十六烷) FID: $D_t<1\times10^{-11}$(正辛烷中正十六烷) FPD: D_t(P)$<2\times10^{-11}$，D_t(S)$<2\times10^{-11}$ ECD: $D_t<2\times10^{-13}$(正己烷中 γ-666)	该仪器为双气路单检测器色谱仪	科研和大、中企事业单位作常量、微量和痕量分析用，也可改为专用分析仪

续表

厂　家	仪器型号	性能与特点	主要技术指标	仪器成套件	适用范围
北京分析仪器厂上海分厂	GC-9002-1型气相色谱仪	单FID检测器，操作方便、简单，性能稳定，可根据用户要求加装毛细管分析装置	FID：$D_t \leqslant 1\times10^{-11}$	主机、FID检测器	沸点低于350 ℃的有机化合物的常量、微量分析
北京分析仪器厂上海分厂	GC-9002-A型液化气分析专用色谱仪	本仪器依据（GB 104103—89）液化石油气组分气相色谱分析法而生产，配液化气专用柱，可用六通阀进样，也可手动进样，分析时间16min	可分离出：空气十甲烷、乙烷、乙烯、丙烷、丙烯、异丁烷、正丁烷、正异丁烷、反-2-丁烯、顺-2-丁烯、丁二烯、异戊烷、正戊烷	主机、热导（TCD）检测器、六通进样阀、液化气专用柱	煤气公司、液化气站、燃气质检部门、燃气具生产厂常规组分分析
北京分析仪器厂上海分厂	GC-9002-B型人工煤气分析专用色谱仪	性能与GC9002-A型仪器类似	可分析煤气中的H_2、O_2、N_2、CO、CO_2、CH_4、C_2H_4、C_2H_6、C_2H_2的含量	主机、TCD检测器、专用分析柱、专用分析系统	同GC 9002-A型仪器
上海分析仪器厂	GC 102G型气相色谱仪	单组合式简易型填充柱色谱仪，色谱柱和检测系统在同一恒温炉内，可用六通阀或注射器进样	FID：$D_t \leqslant 5\times10^{-11}$（苯），$M \leqslant 0.05mV\cdot h^{-1}$ TCD：$S_g \geqslant 80$（N_2），$M \leqslant 0.05mV\cdot h^{-1}$	基本配置：主机、FID、TCD，可选配转化炉	一般分析及教学
上海分析仪器厂	GC 103型气相色谱仪	单组合式简易型色谱仪，配有三个检测器（TCD、FID、ECD）及程序升温	TCD：$S_g \geqslant 1500$ FID：$D_t \leqslant 2\times10^{-1}$[illegible] ECD：$D_t \leqslant 5\times10^{-14}$ FPD：$D_t(S) \leqslant 9\times10^{-1}$[illegible] $D_t(P) \leqslant 5\times10^{-1}$[illegible]	基本配置：主机、TCD、FID、ECD、程序升温装置；可选配FPD、居里点裂解器、制备收集附件及冷阱、毛细管附件	一般分析
上海分析仪器厂	GC 1001型气相色谱仪	可同时安装毛细管柱和填充柱，五种检测器（TCD、FID、ECD、FPD、TSD）可供选择	TCD：$S_g \geqslant 2500$（n-C_{16}） $M \leqslant 0.02mV/15min$ FID：$D_t \leqslant 1\times10^{-11}$（$n$-$C_{16}$），$M = 1\times10^{-13}A/15min$ ECD：$D_t \leqslant 2\times10^{-13}$（$\gamma$-BHC） FPD：$D_t(S) \leqslant 3\times10^{-10}$，$M = 0.02mV/15min$，$D_t(P) \leqslant 2\times10^{-12}$（甲基对硫磷） NPD：$D_t(N) \leqslant 5\times10^{-11}$，$M = 4\times10^{-15}A/15min$，$D_t(P) \leqslant 5\times10^{-12}$（偶氮苯）	基本配置：主机、TCD、FID；可选配ECD、FPD、NPD、微机温控、毛细管附件、色谱数据处理机	科研及一般分析
上海分析仪器厂	GC-1002型气相色谱仪	装嵌式结构，微机控制，填充柱和毛细管柱可同时工作，可选用不分流或冷毛细管柱上进样器，可选配TCD、FID、ECD、NPD、FPD等检测器	TCD：$S_g \geqslant 2500$（n-C_{16}），$M \leqslant 0.02mV/15min$ FID：$D_t \leqslant 1\times10^{-11}$（$n$-$C_{16}$），$M = 1\times10^{-13}A/15min$ ECD：$D_t \leqslant 2\times10^{-13}$（$\gamma$ 666） FPD：$D_t(S) \leqslant 3\times10^{-10}$，$M = 0.02mV/15min$ $D_t(P) \leqslant 2\times10^{-11}$（甲基对硫磷） NPD：$D_t(N) \leqslant 5\times10^{-11}$，$M = 4\times10^{-15}A/15min$，$D_t(P) \leqslant 5\times10^{-12}$（偶氮苯）	基本配置：主机、记录仪；可选配检测器和进样器及色谱数据处理机	科研和大单位用的气相色谱仪

续表

厂　家	仪器型号	性能与特点	主要技术指标	仪器成套性	适用范围
上海分析仪器厂	GC 1102 型气相色谱仪	GC-1100 系列中的简易型色谱仪，微机控制，键盘操作，填充柱和毛细管柱两用，可作全玻璃系统的分析工作，有三种检测器(TCD、FID、ECD)	TCD: S_g>1500(n-C_{16}) FID: D_t≤5×10^{-11}(n-C_{16}) ECD: D≤1×10^{-13}(γ-666)，M=0.02mV/15min	基本配置：主机、控制器；可配多种填充柱和毛细管柱的进样装置 GC-1121 型为配置 FID 的白酒分析专用机	可分析痕量及易催化分解的样品
惠普上海分析仪器厂	18901 型气相色谱仪	实验室多功能分析仪器，有三种检测器(TCD、FID、ECD)可供选择，微机控制，键盘输入，可安装各类毛细管柱和填充柱，有三阶程序升温并有单柱补偿，可作单柱程序升温，TCD 为独一无二的单丝热导	TCD: S_g≥20000(n-C_{16}) FID: D_t≤1×10^{-11}(n-C_{16}) ECD: D_t≤2×10^{-13}(γ-666)	基本配置：主机，可选配 1～2 个检测器和 1～2 个进样器 选配件：TCD、FID、ECD，填充进样器，分流/不分流进样器，3295 色谱数据处理机	科研和大、中企事业单位作常量、微量和痕量的多科性精密分析
惠普上海分析仪器厂	1490 型气相色谱仪	实验室普及型的单气路，高稳定性的气相色谱仪，有两种检测器(TCD、FID)可供选择，可安装各类金属、玻璃填充柱，在使用 FID 时，还可安装 0.53mm 的大口径毛细管柱	TCD: S_g≥1200(n-C_{16})，M≤0.01mV/30min FID: D_t≤5×10^{-11}(n-C_{16})，M≤[illegible]×10^{-12}A/30min	基本配置：主机配 FID 或 TCD	科研和大、中企事业单位作常量、微量的多科性的精密分析
鲁南化工仪器厂	SP-501 型气相色谱仪	实验室多功能分析仪器，有四种检测器(TCD、FID、ECD、FPD)可供选择	TCD: S_g≥1000，M≤0.1mV·h^{-1} FID: D_t≤1×10^{-10}，M≤0.1mV·h^{-1} ECD: D_t≤1×10^{-12} FPD: D_t(S)≤5×10^{-11}，D_t(P)≤3×10^{-11}	主机配置 2 个检测器 可供选配：居里点裂解装置、毛细管系统	适用实验室和工厂
鲁南化工仪器厂	SP-502 型气相色谱仪	多功能高效气相色谱仪，采用微机控制，键盘操作，五阶程序升温，有四种检测器(TCD、FID、ECD、FPD、NPD)可供选择	TCD: S_g≥3000 NPD: D_t(N)≤5×10^{-12} FID: D_t≤1×10^{-11}，D_t(S)≤5×10^{-12} ECD: D_t≤1×10^{-13}g·ml^{-1}(γ-666) FPD: D_t(S)≤5×10^{-11}，D_t(P)≤3×10^{-11}	主机配置 2 个检测器及毛细管系统，微机 可供选配：居里点裂解装置	适用科研和工厂
鲁南化工仪器厂	SP-6800 型气相色谱仪	多用途气相色谱仪，采用微机控制，键盘操作，三阶程序升温，双柱双气路，配有毛细管柱装置，有两种检测器(TCD、FID)	TCD: S_g≥2000(苯)，M≤0.1mV·h^{-1} FID: D_t≤5×10^{-11}，M≤0.1mV·h^{-1}	主机配置双检测器，可配置毛细管系统及微机处理机	适用于实验室和工厂

续表

厂家	仪器型号	性能与特点	主要技术指标	仪器成套性	适用范围
鲁南化工仪器厂	SP-6801 型气相色谱仪	是配置单检测器的小型气相色谱仪，用单片机控制温度和检测器操作	TCD：$S_g\geqslant1500$ FID：$D_t\leqslant1\times10^{-10}$	基本配置：主机，可选用 FID、TCD 中的任意一种	适用于常规分析
鲁南化工仪器厂	SP-9800 型气相色谱仪	气体分析仪，采用双柱并联分流柱系统，配备 TCD 和 FID 双检测器和甲烷转化器	TCD：$S_g\geqslant3000$，最小检测限(H_2)$\leqslant10\times10^{-6}$ FID：$D_t\leqslant1\times10^{-10}$，最小检测浓度($CO$、$CO_2$)$\leqslant10\times10^{-6}$，最小检测浓度($C_2H_2$)$\leqslant10\times10^{-6}$	主机配 TCD 与 FID 检测器、转化炉、进样阀及切换阀，可扩装 FPD 和浓缩进样器、顶空进样器	用于变压器油、天然气、环境及工矿企业气体分析
南京分析仪器厂	CX-200 系列气相色谱仪	普及型多用途气相色谱仪，采用并联双气路结构，两种检测器(TCD、FID)可任选一种	TCD：$S_g\geqslant3000$，线性$>10^4$ FID：$D_t\leqslant1\times10^{-11}$，线性$>10^6$，$M\leqslant0.02\text{mV}\cdot\text{h}^{-1}$	主机配置 1 个或 2 个检测器，组成不同型号：CX-205(TCD、恒温型)；CX-206(双 FID、恒温型)；CX 215(TCD、专用色谱)；CX 216(FID、专用色谱)；CX-220(FID+TCD、恒温型)；CXL-205 裂解色谱(TCD)；CXL 206 裂解色谱(FID)	适用于实验室和工厂
四川仪表九厂	SC 1001 系列气相色谱仪	主机为抽屉式，各单元变换可靠方便，温度控制采用电脑控制数字显示，可进行九阶程序升温，温度设置有二重过温保护，有 TCD、FID、ECD、FPD、NPD 五种检测器供选配	TCD：$S_g\geqslant2500$，线性$>10^4$ FID：$D_t\leqslant5\times10^{-11}$，线性$>10^6$ ECD：$D_t\leqslant1\times10^{-12}$，线性$>10^4$ FPD：D_t(S)$\leqslant5\times10^{-11}$，D_t(P)$\leqslant1\times10^{-11}$，线性$>10^4$ NPD：$D_t\leqslant5\times10^{-11}$(偶氮苯)，$D_t\leqslant5\times10^{-12}$(甲基对硫磷)，线性$>10^3$	基型装有填充柱、毛细管柱气路，可选配五种检测器 SC-1001-07 为专用毛细管色谱仪；SC 1001-08 配高灵敏度的 TCD 及六通阀；SC-1001-09 为白酒专用机，恒温型；SC-1001-09A 为白酒专用机，电脑温控，可程序升温；SC-1001 04 天然气专用机	适用于实验室和工矿企业 08 型适用沸点 300℃以下样品的分析；07 型适用于宽沸程样品的分析；09 型适用于白酒分析；04 型适用于天然气分析
四川仪表九厂	SC 200 系列气相色谱仪	主要电器元件选用大规模集成电路，仪器操作简单、可靠、稳定性好	四路定温控制，可参照数字设定数字显示，TCD、FID 同 SC-1001 系列仪器	可选配双氢焰、双热导或氢焰-热导三种不同的规格 SC-206 电脑温控，数字显示，九阶程序升温；SC-207 以毛细管色谱分析为主；SC-208 配高灵敏度的 TCD 及六通阀，其 $M\geqslant3000$	适用于大专院校及一般科研所，更适合工厂测定质量控制
四川仪表九厂	JSC 01 型气相色谱仪	具有敞开式演式板结构，为学校演示仪，示教性强	0.2ml 空气的 N_2 峰高不低于 200mm，仅有 TCD	配有恒流源的 TCD 及 13X 分子筛的色谱柱	适于教学演示用

续表

厂　家	仪器型号	性能与特点	主要技术指标	仪器成套性	适用范围
四川仪表九厂	JSC-02 型气相色谱仪	外形小巧、紧凑，柱箱、气化室及热导用一个温控	可室温、75 ℃、100 ℃、125 ℃、150 ℃五种温度下操作，仅有 TCD	配有恒流源的 TCD 一个及温度控制器一个	除教学示范外，可对沸点 150 ℃以下的物质进行分析
中科院大连化学物理研究所	GS-101 系列气相色谱仪	仪器紧凑，有两种检测器(TCD 和 FID)供选用，有三路温控及超温保护	TCD：$S_g \geqslant 1000$，$M \leqslant 0.2$mV/30min，$S_g \geqslant 2000$(D 型) FID：$D_t \leqslant 5\times10^{-11}$，$M \leqslant 10^{-6}$mA/30min	基型有三路温控及程序升温，两个检测器；D 型配 TCD 和 FID，并有六通气体进样装置；C 型配 FID 及催化转化炉	通用型适于科研及工厂；D 型专用于电力系统；C 型用于 CO、CO_2 痕量分析
中科院大连化学物理研究所	GS-1 型气相色谱仪	配有专用色谱分析柱及分析方法的色谱仪，对乙炔的检测可达 0.005×10^{-6}	FID：$D_t \leqslant 1\times10^{-11}$，$M \leqslant 10^{-8}$mA/30min	配 FID 及富集浓缩六通阀气体进样装置及专用色谱柱	空分专用机
中科院大连化学物理研究所	GS-5 型气相色谱仪	配有专用色谱分析柱及分析方法的在线气相色谱仪	FID：$D_t \leqslant 1\times10^{-11}$，$M \leqslant 10^{-8}$mA/30min	配 FID、富集浓缩装置、在线装置及工作站	空分专用机
中科院大连化学物理研究所	DHP-05 型气相色谱仪	采用改性的氩离子化检测器，双柱、双阀切换流程	MArID 最小检测浓度(1×10^{-6}) H_2：0.3；O_2：0.2；N_2：0.4；CH_4：0.07；CO：1.5；CO_2：0.09	有手动分析和自动分析两种型号，可通过微机或计算机控制分析条件和处理数据	适用于超纯气分析
上海科创色谱仪器公司	GC-910 系列气相色谱仪	恒温型，小型单检测器	TCD：$S_g \geqslant 2500$(苯) FID：$D_t \leqslant 2\times10$(苯) ECD：$D_t \leqslant 2\times10^{-13}$($\gamma$-666) CCD：$D_t \leqslant 1\times10^{-10}$(苯)	910T 型配 TC 1 热导检测器；910F 型配 FID 氢焰检测器；910E 型配 ECD 电子捕获检测器；910C 型配 CCD 催化检测器	适用于工矿企业和学校的常规分析
上海科创色谱仪器公司	GC-88 系列气相色谱仪	单元组合式实用型机，可供选择配置的检测器有：TC-1 热导检测器；TC-4 微型热导检测器；TC-H 高灵敏度的热导检测器；FID 可选单、双二种类型；ECD 温度控制可选恒温型和微机程序升温型；FID 为石英喷嘴；TC-4 和 FID 均可填充柱和毛细管两用	TCD：$S_g \geqslant 2500$(苯) FID：$D_t \leqslant 2\times10^{-11}$(苯) ECD：$D_t \leqslant 2\times10^{-13}$($\gamma$-666) TC-4 微热导池体积 28μl 可和毛细管联用；TC-H 高灵敏度热导池，元件冷阻 200Ω，最小检测浓度 $H_2 \leqslant 1\times10^{-6}$、$O_2 \leqslant 2\times10^{-6}$、$N_2 \leqslant 3\times10^{-6}$	8800A 型配 TC-1 热导池；8800C 型配 TC-4 微型热导池；8800H 型配 TC-H 高灵敏热导池；8820A 型配单 FID、恒温温控；8820B 型配单 FID、微机温控；8820C 型配双 FID、微机温控；8820H 型配 FID、转化炉，恒温温控；8810A 型配 TCD、FID，恒温型；8810C 型配 TCD、FID，微机温控；8810D 型配 ECD、FID，微机温控；8810AD 型配 TCD、FID、转化炉，微机温控；TYS-2 型配双 FID，恒温温控	适用于工矿企业、高等院校和科研单位的质量控制和微量气体分析 8800H、8820H 专门用于高纯气体的分析；TYS－2 用于天然气和天然气硫磺回收过程气分析；8810AD 为电力变压器油检测专用

续表

厂　家	仪器型号	性能与特点	主要技术指标	仪器成套性	适用范围
上海科创色谱仪器公司	GC-900 系列气相色谱仪	高效高性能机型，全微机化按键操作(四路温控、检测器、流量显示)；可同时选配三种检测器(TC-1、TC-4、FID、ECD、FPD)；TC-1 微热导可同时联接填充柱和毛细管柱；全新的电子质量流量计，载气流量数字显示，流量测量精度 1～60ml·min⁻¹，1.5 级；有超温保护、故障显示；有秒表功能可按时间程序自动控制操作；有抗突然断电干扰的功能	FID：$D_t \leqslant 1\times10^{-11}$($n$-$C_{16}$) ECD：$D_t \leqslant 2\times10^{-13}$($\gamma$-666) FPD：$D_t(S)\leqslant 2\times10^{-10}$，$D_t(P)\leqslant 1\times10^{-11}$ 稳定性：基线漂移$\leqslant$20μV/15min，噪音$\leqslant$10μV	基型配双 FID 氢焰检测器，可选配：TC-1 热导池、TC-4 微热导池、ECD 电子捕获检测器、FPD 火焰光度检测器、双路电子质量流量计，根据需要可以加配气体进样装置，镍转化炉	适用于工矿企业、高等院校和科研单位的常量、微量精密分析，尤其适用于从近室温到高温的程序升温毛细管色谱分析
上海市计算技术研究所	GC-920 型气相色谱仪	多功能的高效气相色谱仪，微机自动控制，全键盘操作；五阶程序升温功能，柱箱、检测器自动过热保护功能和文件存储功能；可配置多种填充柱、毛细管柱进样系统；TCD、FID、ECD、FPD 等检测器可供选择，可同时安装三种	TCD：$S_g \geqslant 2000$(n-C_{16}) FID：$D_t \leqslant 1\times10^{-11}$($n$-$C_{16}$) ECD：$D_t \leqslant 0.2\times10^{-12}$($\gamma$-666) FPD：$D_t(S)\leqslant 5\times10^{-11}$(噻吩)、$D_t(P)\leqslant 1\times10^{-11}$(对硫磷)	基本配置是主机配 TCD 和 FID 检测器；根据需要选配 ECD、FPD 检测器、毛细管系统及其他可选件	适用于科研院所、大中型工厂实验室作精密分析
上海市计算技术研究所	GC-950 型气相色谱仪	实用普及型的气相色谱仪，微机自动控制，全键盘操作；五阶程序升温功能，柱箱、检测器自动过热保护功能和文件存储功能；可配置填充柱柱上进样或气化进样、气体阀进样；TCD、FID 检测器可供选择	TCD：$S_g \geqslant 1500$(n-C_{16})，M　0.1mV/30min FID：$D_t \leqslant 1\times10^{-11}$($n$-$C_{16}$)，$M$　5×10^{-3}A/30min	基本配置是主机配 TCD 或 FID 检测器；其他可选件根据需要选配	适用于实验室和工厂车间作常规分析
上海市计算技术研究所	GC-900-SD 气相色谱仪	电力系统专用分析变压器油中的溶解气体组分含量的分析仪器；双柱并联分流系统，配 TCD 和双单 FID 三检测器，通过人机对话，编制时间程序来实现 TCD 和 FID 的自动切换，一次进样可实现 8 种气体含量的自动全分析	最小检测浓度 $H_2 \leqslant 10\times10^{-6}$，CO、$CO_2 \leqslant 2\times10^{-6}$、$C_2H_2 \leqslant 0.5\times10^{-6}$	主机配 TCD 和双、单 FID 三检测器、一个镍转化炉，并配有遥控开关；有专用色谱工作站与之配用	适用于电力系统专用分析变压器油中的溶解气体组分含量

续表

厂　家	仪器型号	性能与特点	主要技术指标	仪器成套性	适用范围
北京市东西电子技术研究所	GC-4000系列气相色谱仪	多用途实验室用色谱仪，微机控制，操作方便，具有多阶程序升温功能，不同型号的主机分别配单FID或双FID、FID与TCD两种检测器	TCD：$S_g \geq 5000$(苯)，$M=1$ FID：$D_t \leq 1\times10^{-11}$，$M=0.6$	基本配置：主机、微机和一个或二个检测器 可选配：毛细管装置、转化炉及不同版本的工作站 GC-4001～GC-4005型为不同配置的通用型色谱仪；GC-4006型为天然气全分析仪；GC-4007型为变压器油分析仪；GC-4008型为煤矿专用仪；GC-4009型为环境检测卫生防疫用色谱仪，配ECD	通用机，适宜一般分析
Hewlett-Packard Co.	HP5890 Ⅱ型气相色谱仪	高性能气相色谱仪，微机操作，屏幕显示，温度控制精度高范围广，六个通道的电子压力控制(EPC)实现气路的数字化调节和程序控制，配全自动样品制备和全自动进样系统，适用于多种样品和方法的进样，有8种检测器供配置(TCD、FID、ECD、NPD、FPD、AED、MSD、IRD)，还有两种检测器供选配(PID、ELCD)，TCD用单丝射流进样，池容积仅为3.5μl，可与毛细管直接联用，ECD采用阳极吹扫，池体下部涂镍，增加稳定性和寿命	TCD：$S_g \geq 400pg \cdot ml^{-1}$，线性$10^5$ FID：$D_t \leq 5pg \cdot s^{-1}$，线性$10^7$ ECD：$D_t \leq 0.04pg \cdot s^{-1}$(Y-666) FPD：$D_t(S) \leq 20pg \cdot s^{-1}$，$D_t(P) \leq 0.9pg \cdot s^{-1}$ NPD：$D_t(N) \leq 0.4pg \cdot s^{-1}$，$N/C=3.5\times10^4$ $D_t(P) \leq 0.2pg \cdot s^{-1}$，$P/C=7.5\times10^4$	除主机外，可配置多种样品和方法的进样口(隔垫吹扫填充进样口，程度升温冷柱头进样口和带EPC功能的进样口，以及气体阀、液体阀进样)；十种检测器可供选择；配HP7673自动进样器和HP7686自动样品制备工作台可实现无人操作；可配积分仪或HPG1255A化学工作站	适用于科研及复杂精密的分析测试
Hewlett-Packard Co.	HP6890型气相色谱仪	在5890Ⅱ型的基础上更提高了一步，采用第三代EPC，可对所有气路实现数字化调节和程度控制，达到无泄漏、高度自动化；配置HP化学工作站使操作更加简捷，配置HPIB/RS 232接口，可与其他数据处理系统和自动化系统相连	同HP5890Ⅱ型仪器	同HP5890Ⅱ型仪器	同HP5890型仪器

续表

厂　家	仪器型号	性能与特点	主要技术指标	仪器成套性	适用范围
Hewlett-Packard Co.	HP4890D 型气相色谱仪	键盘设定操作条件，可储存两个分析方法，有多种进样方法供填充柱或毛细管柱选择，可选用 TCD 或 FID，二段程序升温	参见 HP5890 型仪器	主机，可任选填充柱或毛细管柱进样系统，任选 TCD、ECD 或 FID 检测器，可与顶空进样、自动进样、六通阀进样等设备联用	用于常规分析
Hewlett Packard Co.	HP 490 型气相色谱仪	普及型单检测器和色谱仪，温度采用数字拨盘式设定，数码管显示，恒温操作	TCD：$S_g \geq 1200$，M — 0.1mV/30min FID：$D_t=5\times10^{-12}$，$M=1\times10^{-13}$A/30min	主机，FID 或 TCD 可任选一个，可配积分仪或微处理机	用于常规分析
Perkin Elmer Co.	Autosystem XL 型气相色谱仪	高性能的气相色谱仪，配有全能的毛细管进样系统 PSS，可编程的全流路控制装置 PPS，独特的预排切割反吹装置 Pre Vent 和精密的温控，并有多种检测器（TCD、FID、ECD、NPD、FPD、ELCD、PID、FT-IRD）和 Turboch-rom™ 多功能色谱工作站供选配	TCD：$D_t<1\times10^{-6}$，线性 $>10^5$，可与毛细管柱联用 FID：$D_t\leq3\times10^{-12}$，线性 $>10^6$ ECD：$D_t\leq0.05$pg・s^{-1}(CCl_4)，线性 $>10^4$	除主机外可选配两个检测器和两个气化进样器；可选配自动进样、顶空进样 HS40、ATD400 热脱附分析装置；可选配 Turboch-rom™ 系列工作站或 1022 小型色谱工作站；可选配干冰/液氮低温控制器，使柱温控制在 −100 ℃ ～450 ℃	科研和精密、复杂的分析
Perkin-Elmer Co.	ARIES™ 型气相色谱仪	多点在线气相色谱仪，结构紧凑，微机控制，可以远距离或现场多点快速测量空气中有毒化学品	PID：$D_t<0.1\times10^{-9}$(苯)		现场监测
Perkin-Elmer Co.	Micro FID™ 型气相色谱仪	Micro FID™ 火焰离子化检测器，由充电电池供电的手提式挥发性有机物总量（VOCs）监测仪，采用 FID，用于碳氢化合物总量或 VOCs 总量的测量，具有声音报警功能	总重量<3.7kg(8.1 磅) FID：$D_t=0.5\times10^{-6}$(CH_4) 测定范围：0.5～5×10^4 可连续工作 15h		环境保护，短时排放监测中的 VOCs 的超级测定
Perkin-Elmer Co.	Micro TIP™ 型气相色谱仪	Micro TIP™ 手提式光离子化检测器，广泛用于可光离子化有机物总量（TIP）的环境保护、工业卫生和职业安全的监测，具有声音报警功能	总重量 2.38kg(5 磅) PID：$D_t=0.1\times10^{-6}$ 测定范围：0.1～2×10^3 可连续工作(7～12)h	除主机外配稀释探头，浓度范围可延深至 2×10^4	环境保护，工业卫生和职业安全的监测

续表

厂 家	仪器型号	性能与特点	主要技术指标	仪器成套性	适用范围
Perkin-Elmer Co.	2020型气体检测仪	2020袖珍式气体光离子化气体检测仪，由充电电池供电，采用光离子化检测器，用于挥发性有机物总量(VOCs)的测量，具有声音报警功能	总重量＜0.79kg(1.75磅) PID：$D_t=0.5\times10^{-6}$ 测定范围：0.5～2×10⁵ 可连续工作8h	除主机外配稀释探头，浓度范围可延探至(2×10³～2×10⁴)	用于环境保护和工业卫生方面的监测
Perkin-Elmer Co.	Snap Shot™型气相色谱仪	SnapShot™是有充电电池供电的手提式气相色谱仪，具有报警功能，采用FID用于VOC的测量	总重量＜3.8kg(8.3磅) FID：$D_t=0.1\times10^{-6}$(苯) 可连续工作(4～6)h	除主机外可配微机或计算机	用于环境保护，车间安全及职业卫生方面的监测
Perkin-Elmer Co.	Iosplus™型气相色谱仪	Iosplus™便携式光离子化气相色谱仪，可用于可光离子化有机物组分浓度测定，具有自动进样及报警功能	总重量＜13.5kg(29.7磅) PID：$D_t=1\times10^{-12}$(苯) 测定范围0～2000 可连续工作(8～12)h	除主机外安装第二检测器；可进行VOCs总量测定；可配计算机和打印机	用于环境保护、职业卫生方面的监测
Varian Instrument Group	GC Star 3400CX型气相色谱仪	高性能常规气相色谱仪，由触摸式面板实现仪器的单点控制，仪器所有参数通过微机可全自动控制，数字流量控制器实现了流量的精确设置和监测，仪器有五个加热区，三个进样口，及8种检测器(FID、TCD、ITD、ECD、FPD、NPD、PID、ELCD)供选择	TCD：$S_g\geqslant3\times10^{-10}$ g·ml⁻¹，线性10⁶ FID：$D_t\leqslant$2pg·s⁻¹，线性10⁷ ECD：$D_t\leqslant$50fg·s⁻¹(γ-666) FPD：D_t(S)≤100pg·s⁻¹，动态范围＝10³，D_t(P)≤1pg·s⁻¹，动态范围＝10⁵ NPD：D_t(N)≤0.4pg·s⁻¹，线性10⁵，$N/C=3.5\times10^4$ D(P)≤0.2pg·s⁻¹，线性10⁴，$P/C=7.5\times10^4$ PFPD：D_t(N)≤20pg·s⁻¹，线性10²，$N/C\geqslant10^5$，D_t(S)≤1pg·s⁻¹，线性10³，$S/C\geqslant10^6$，D(P)≤0.1pg·s⁻¹，线性10⁻，$P/C\geqslant10^6$ ELCD：D_t(N)≤10pg·s⁻¹，线性10⁵，D_t(S)≤10pg·s⁻¹，线性10⁴，D_t(卤素)≤10pg·s⁻¹，线性10⁶ PID：$D_t\leqslant$10pg·s⁻¹，线性10⁴	主机包括内置式打印机/绘图仪；可选用三个进样装置和三个检测器，并可与以PC机为基础的色谱工作站联用	适用于科研及生产单位分析测试用
Varian instrument Group	GC Star 3600CX型气相色谱仪	电器与3400型相同，但柱箱宽敞，有7个加热区，可同时装四根填充柱或两根填充柱及一根毛细管柱，同时安装四个检测器和四个进样口	同3400型仪器	同3400型仪器	科研院所及工矿企业中心实验室作多科性精密分析研究

续表

厂　家	仪器型号	性能与特点	主要技术指标	仪器成套性	适用范围
岛津制作所	GC-17A 型气相色谱仪	高性能气相色谱仪，通过先进的流量控制系统(AFC)和大屏幕显示，直接设定各种分析条件(包括气体压力，流量)，利用高速光导纤维传输接口，通过数据处理机或工作站对分析条件进行设定、监测，气化室采用 PTV(程序升温)不仅可降低样品分解，而且可以实现大体积进样	TCD：S_g≥2000 FID：D_t≤5pg・s^{-1} ECD：D_t≤1×10^{-14}(γ-666)，动态线性 10^4 FPD：D_t(S)≤2×10^{-11}(噻吩)，D_t(P)≤9×10^{-13}(DDVP) NPD：D_t(N)≤4×10^{-13}(偶氮苯)，D_t(P)≤9×10^{-13}(马拉硫磷)	主要配置：主机；可选配 5 种检测器；任意选配进样器；可选配 PTV，自动进样器、AOC-17 或顶空进样 MSS-4A；FID 可选普通型或宽量程型；流量控制可选自动或手动；数据处理可选 C-R7A 或 Class GC10 工作站	适用于科研和精密、复杂的分析
岛津制作所	GC-8A 型气相色谱仪	简易型，单检测器，填充柱和毛细管柱双用的气相色谱仪，有四种检测器(TCD、FID、ECD、FPD)供选择，有恒温、程序升温和自动重复程序升温三种系列，毛细管进样有分流、分流/不分流和柱上进样	TCD：最小检测量 0.5μg FID：D_t≤3×10^{-12}，线性 10^5，M≤2×10^{-14} ECD：D_t≤0.2pg・s^{-1}(γ-BHC)，线性 10^4 FPD：D_t(S)≤5×10^{-11}，D_t(P)≤1×10^{-12}，线性 10^5，M≤2×10^{-12}	主要配置：主机，四个检测器可任选一种；三种升温方式也可任选一种，共组合成 9 种不同的型号	可供科研和大、中企事业单位作一般性分析
岛津制作所	GC-9A 型气相色谱仪	双柱、双检测器系统，用微机控制，键盘操作，液晶数字显示，可多阶程序升温，毛细管进样有分流、分流/不分流和柱上进样，	TCD、FID、ECD、FPD 同 8A 型； NPD：D_t(N)≤3.5×10^{-14}(偶氮苯)，N/C=1.5×10^4，D_t(P)≤1×10^{-12}(对硫磷)，P/C=1.5×10^5，线性 1.4×10^4	主要配置：主机，TCD、FID 中任意二种检测器；ECD、FPD、NPD 可另选用，也可配置 C-R7A 数据处理机和自动进样器	可供科研和大、中企事业单位作一般性分析
岛津制作所	GC-14B 型气相色谱仪	微机控制的单检测器、填充柱和毛细管柱双用的气相色谱仪，进样有分流、分流/不分流和柱上进样、冷柱上进样	同 9A 型，ECD　恒温控制时：D_t≤0.2pg・s^{-1}(γ-BHC)，线性 10^4 恒流控制时：D_t≤0.5pg・s^{-1}(γ-BHC)，线性 3×10^3	主要配置：主机，检测器可在 5 种检测器中任选一种，可配置 AOC 1400 自动进样器和 MS、FTIR	可供科研和大、中企事业单位作精密分析测试
SRI Instrument	SRI8610 型气相色谱仪	最小型台式气相色谱仪，有 7 种检测器(TCD、FID、ECD、PID、NPD、DELCD、FPD)可供选择，所有气路由电子压力控制(EPC)，随机附送 PEAKSIMPLE FOR WINDOWS 数据处理软件	TCD：最小检测浓度 100×10^{-6}气体 PID：最小检测浓度 100×10^{-9}芳香有机物 FID：最小检测浓度 1×10^{-6}有机物 NPD：最小检测浓度 1×10^{-6} FPD：最小检测浓度 50×10^{-9}(P)500×10^{-9}(S) ECD：最小检测浓度 1×10^{-9}(有机氯化合物) DELCD：最小检测浓度 1×10^{-9}(有机氯化合物)	主机配多至 5 种检测器，可扩充至双柱炉；可选附件包括顶空进样，EPA 式吹扫富集进样器，气体进样阀及液体自动进样器等；另有专用分析仪，如 BTEX、CFC、MTBE、气体分析等	石化，环保单位快速现场分析，可置于流动实验室，学校、科研单位教学应用

第二节　填充柱气相色谱仪

填充柱气相色谱仪是用填充柱进行组分分析的仪器。典型的配有氢火焰离子化检测器的填充柱气相色谱仪流程如图 3-3 所示。

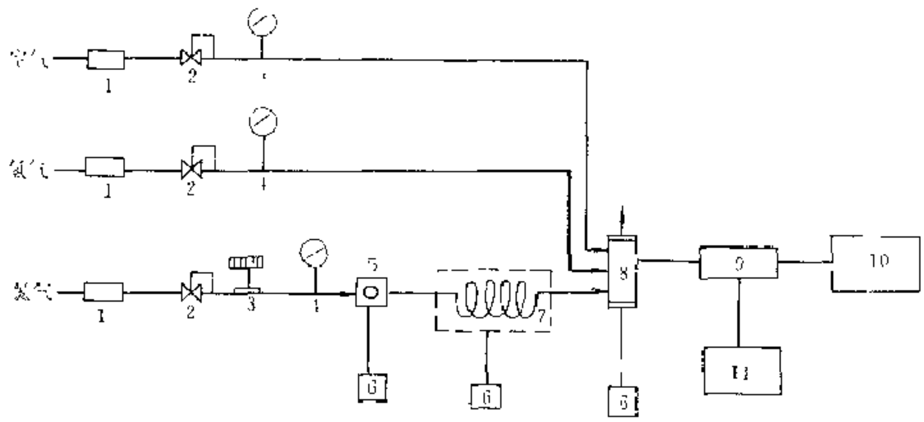


图 3-3　氢火焰离子化检测器填充柱气相色谱仪流程图

1—净化管；2—稳压阀；3—稳流阀；4—压力表；5—进样室；6—温控；7—填充色谱柱；
8—氢火焰离子化检测器；9—放大器；10—记录器；11—积分仪

气路系统有氮气、氢气和空气等流路。我国多用氮气作载气，氢气和空气分别作燃烧气和助燃气。载气出高压钢瓶或其他高压气源经减压阀进入净化及干燥管，再经稳压阀、稳流阀以一定的流速通过气化室、色谱柱、检测器，最后被放空。氢气和空气分别由高压钢瓶或其他高压气源经减压阀进入净化及干燥管，再经稳压阀或调节阀进入检测器，燃烧后逸出。

分离系统由气化室和填充柱组成。用进样阀、注射器或自动进样器等，将样品送入气化室（或进样室）。色谱柱通常为内径（2～4）mm，长（1～3）m 的不锈钢柱或玻璃柱，内装填固定相。样品从气化室被载气携带通过填充柱，各组分在柱内被分离后进入检测器。

温度控制系统由温度控制器和指示仪表组成，用于控制和指示气化室、色谱柱柱箱和检测器的温度。色谱柱置于带鼓风装置的严格保温的柱箱内，柱温由控制柱箱温度实现。柱箱在恒温或程序升温下工作。检测器和气化室通常在恒温下工作。

检测系统包括检测器、微电流放大器、记录器等部件。组分在检测器中被测出并转化成电信号，经微电流放大器放大后送到记录器或积分仪。记录器可以直接绘出色谱流出曲线。最简单的数据处理系统是积分仪，可以给出色谱峰的流出时间和峰面积，并进行简单的定量计算。现代的数据处理系统多是一个专用的微处理机或配有专用软件的通用微型计算机构成的工作站，可以采集检测系统输出的随时间变化的电信号，进行峰的检测判断、绘出色谱图，并给出定性、定量的结果。

目前国外先进的气相色谱仪都采用电子气路控制技术（electronic pneumatic control），可以对气相色谱仪的所有气路参数（压力和流量）实现数字化调节和程序控制，使气相色谱真正进入全面自动化。电子气路控制技术的采用还极大地提高了分析的重现性、稳定性、灵敏度和分析速度，同时也能有效地减少气体消耗和降低操作费用。

第三节　毛细管柱气相色谱仪

毛细管柱气相色谱仪是用毛细管柱进行组分分离的仪器。与填充柱气相色谱仪相比，除

了采用毛细管柱外，进样系统也做了相应的改进，用以保证与毛细管柱的低流量、高柱效相匹配，和保证定量的重复性与准确性。

毛细管柱气相色谱仪的进样方式，按流动方式有分流、不分流、直接进样和柱头进样四种，见图 3-4。按加热方式有恒温和程序升温两种。最通用的是恒温分流式进样，见图 3-5[11]。

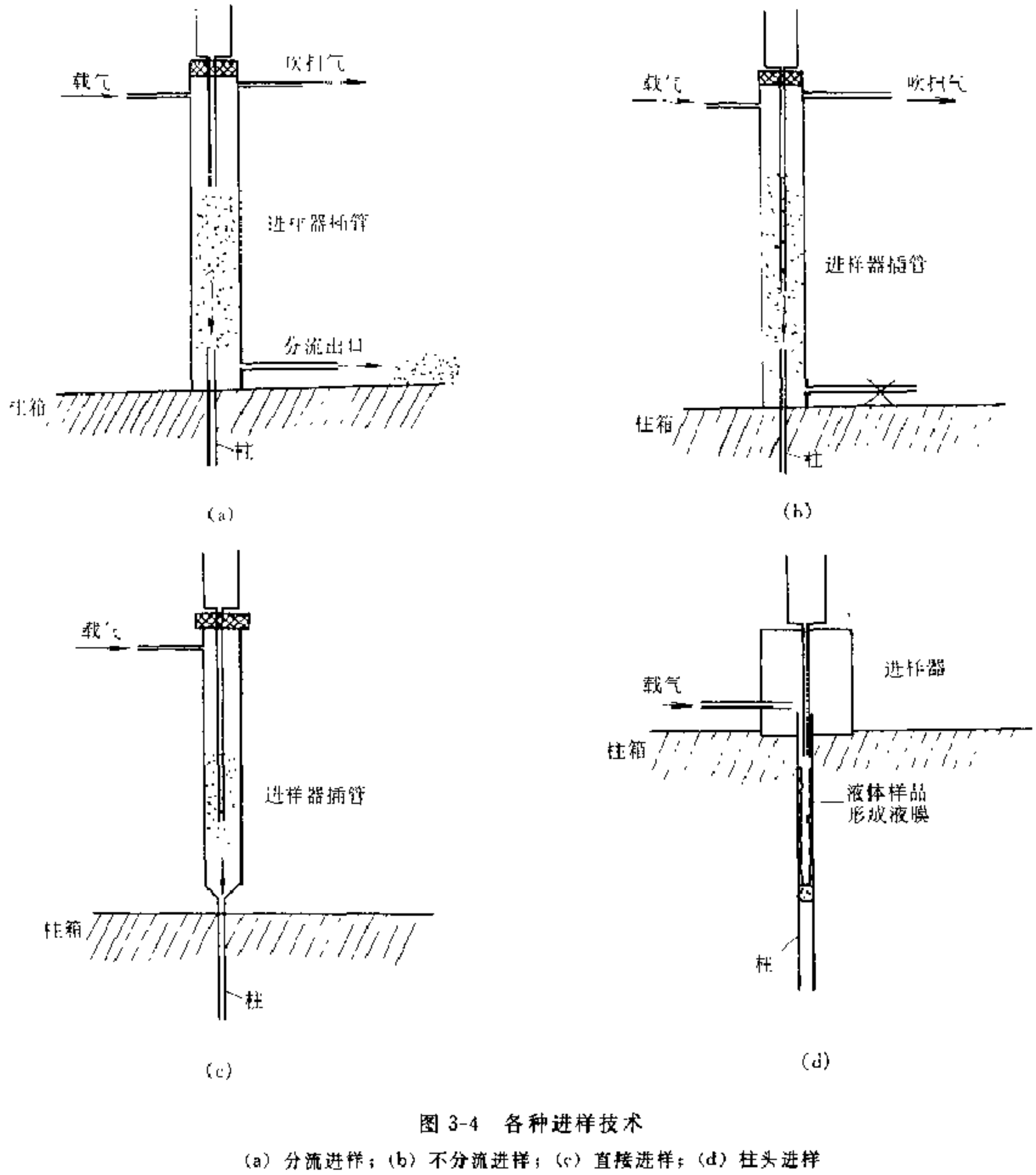


图 3-4　各种进样技术

(a) 分流进样；(b) 不分流进样；(c) 直接进样；(d) 柱头进样

图 3-4 的几种进样方式介绍如下：

①分流进样　这是最经典的进样方式，液体样品在加热的气化室内气化，气化后的蒸气或气体被载气带到柱入口，大部分经分流管道放空，极少一部分被带入柱子。分流进样方式常被用于浓度较高的样品，分流进样可以避免初始谱带的扩展，保证得到较尖锐的峰形。

②无分流进样　无分流进样即进样时没有分流。当大部分样品进入柱子后，打开分流阀，对进样器进行吹扫。这种形式进样，几乎所有样品都进入柱子，适用于痕量分析。但进样时间长达（30～90）s，结果引起初始谱带严重扩展；必须采用冷阱或溶剂效应消除初始谱带的

扩展。这种形式的进样有很好的定量精度和准确度。

③直接进样　直接进样与无分流进样相似，但是进样器与普通填充柱气相色谱仪的进样器相同，没有分流管道，进样后不能对进样器进行吹扫。通常采用填充柱气相色谱仪与粗口径毛细管柱（内径 0.53mm）直接联用，载气一般采用高流速 [(10～25) ml · min^{-1}]，以减少初始谱带扩展。这种进样方式不仅具有很好的定量精度和准确性，而且适用于痕量分析。目前色谱仪常装备程序升温进样器（PTV），采取程序升温方式直接进样，其柱分离和定量结果都可以达到采取程序升温方式柱上进样的水平。

④柱头进样　柱头进样亦称为柱上进样为 Zlatkis 于 1959 年首次提出[12]，适用于大口径毛细管柱。样品直接进入未涂渍固定液的预柱（retention gap）或柱入口。进样部分的温度应相当低，以防溶剂在进样针头气化。样品在冷的柱壁上形成液膜，组分在液膜上实现气化。目前这已成为分析较高沸点和热不稳定样品最常采用的进样方式。已有许多型号的自动进样器，可用于标准孔径（250/320μm）的毛细管柱的柱头进样。

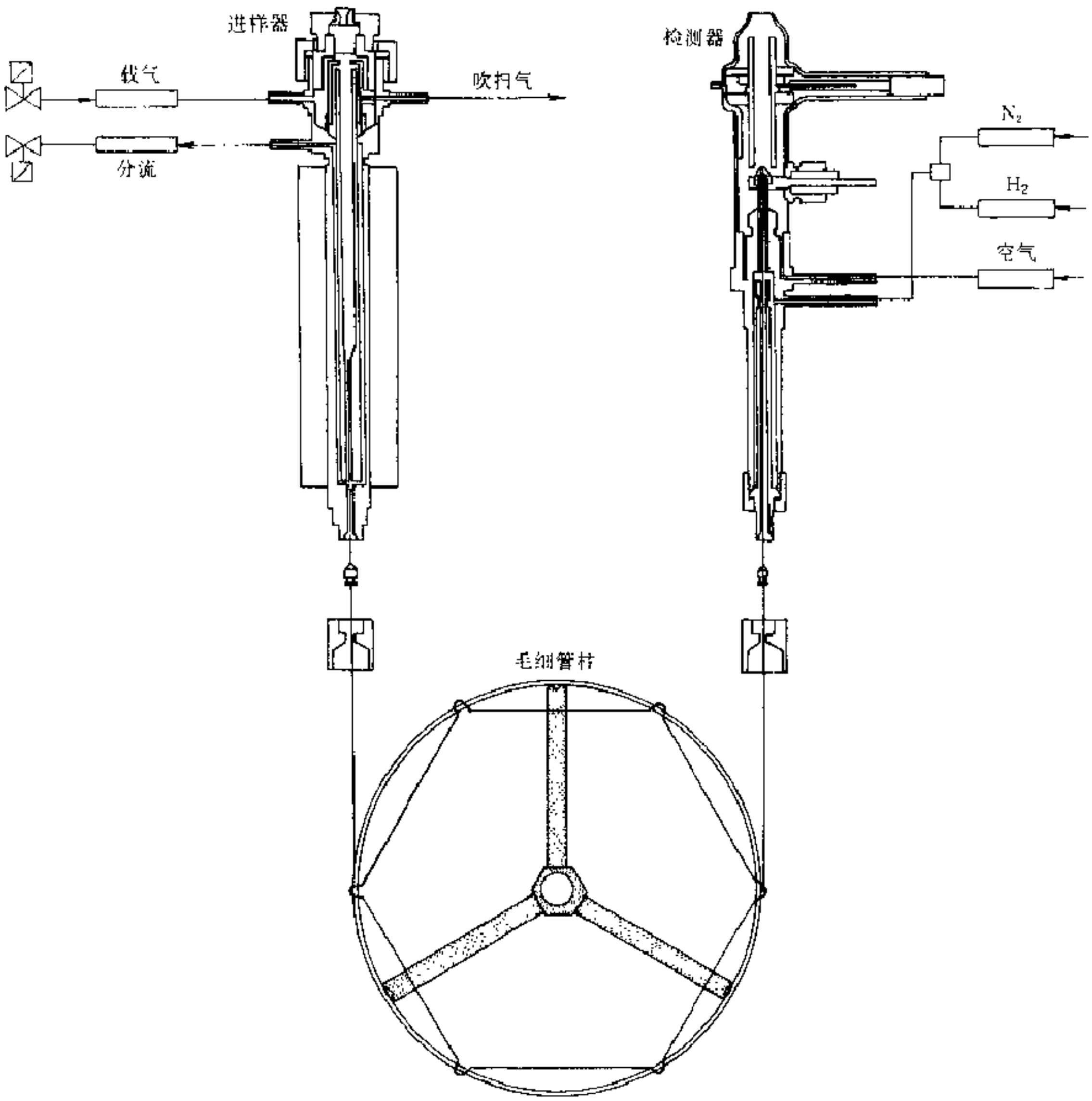


图 3-5　恒温分流式进样结构图

程序升温方式为目前最理想的一种进样方式，近年先进的气相色谱仪都装备了程序升温进样器（PTV）。它最早是由 Vogt 提出[13]，用注射器进行冷进样，以弹道式快速程序升温方式使样品在气化室内迅速气化，并可以按分流、不分流、直接或冷柱头等方式进样。

被人们公认为样品失真较小的进样方式为冷柱上程序升温进样。它不仅可以降低分流、不分流进样所具有的畸变、热降解和吸附效应，而且可以使许多类型的样品都能得到很好的分析结果。

美国 Perkin-Elmer 公司最近推出的 Auto-System XL，在进样技术上有新的突破[14]。它采用程序升温毛细管分流/不分流技术（PSS），可解决大体积进样（其关键为采用溶剂吹扫技术）。液体样品注入气化室衬管后，打开分流阀，载气以（50～100）ml・min^{-1}的速度把溶剂从分流口吹出，然后气化室程序升温，残留在衬管内的溶质气化后被载气带入柱子，从而实现样品在气化室内预浓缩，大大降低了最低检测浓度。

毛细管气相色谱仪无论采用什么样的进样装置，都会给定量带来一定的误差。这方面有专门的文章论述[1]。色谱工作者可根据分析对象及分析要求，采用适当的进样装置和适当的进样技术，以保证获得满意的定量结果。其他型式的进样技术可参阅有关文献［15～18］。

毛细管柱气相色谱仪柱后一般都采用补氮（FID）或减小检测器池体积（TCD），以减少柱后谱带扩展。

第四节　联用气相色谱仪

气相色谱法具有分离能力强和分析速度快的优点。但对组分定性时，若仅依据保留值，则难以对复杂未知物作出最终判断。质谱（MS），红外光谱（IR）、核磁共振波谱（NMR）等手段具有很强的结构判断能力。将气相色谱与这些方法相结合的联用机，就能充分发挥二者之长，成为当今分析复杂混合物的有力工具。气相色谱仪可视为其他谱仪的进样和分离装置；而其他谱仪则可视为气相色谱议的检测器。目前气相色谱-质谱联用（GC-MS）以及气相色谱-傅里叶变换红外光谱联用（GC-FITR）最成功。激光拉曼光谱、光声光谱、微波等离子体原子光谱以及原子发射光谱等与气相色谱联用的研究也相当活跃。

一、GC-MS 联用仪

在气相色谱仪和所有谱仪联用中，GC-MS 的接口最简易，也最可靠，所以 GC-MS 被最早实现。近两年，由于价格大幅度降低，设备日趋简易，仪器的稳定性和寿命大大提高，促使 MS 成为最通用的气相色谱检测器之一[2]。

在 GC-MS 联用仪器中，样品组分先经过气相色谱柱分离，然后进入质谱仪。在质谱仪中，有机分子在高真空下，受电子流轰击或强电场作用，离解成各具特征质量的碎片离子和分子离子。这些带正电荷的离子，具有不同质荷比 m/z（即相对离子质量与电荷之比），在磁场中它们被分离。收集，记录这些离子的信号及其强度，便可得到各组分的质谱图。由该图可获得有关分子质量与结构方面的信息。典型的气相色谱-质谱联用系统如图 3-6 所示。

现今的 GC-MS 联用仪中，价廉的四极质谱计获得广泛的使用[19～20]。四极质谱计中，不同 m/z 值离子的分辨是由改变射频场来完成的。

质谱的离子源除了电子轰击型（EI）源外，还有化学电离型（CI）[22～23] 及电感耦合等离子型（ICP）等[24～26]。

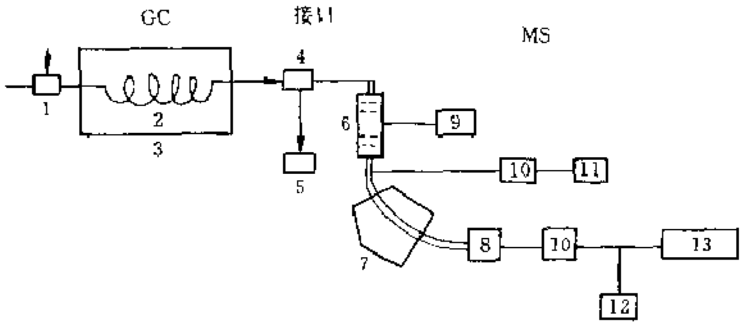


图 3-6 气相色谱-质谱联用流程图

1—进样室；2—色谱柱；3—色谱炉；4—分子分离器；5—真空泵；6—离子源；7—质量分析器；8—电子倍增器；9—真空系统；10—放大器；11—记录器；12—光线示波器；13—微型计算机

二、GC-FTIR 联用仪

在气相色谱与红外光谱联用仪中，样品组分经气相色谱仪分离后，通过接口进入傅里叶变换红外光谱仪。组分在红外仪内受红外线的照射，吸收某些波长的辐射波，导致分子的某些特定振动-转动能级发生跃迁。其跃迁与组成分子的各基团及其所处的化学环境密切相关。所以从实测的红外吸收光谱图便可以获得有关分子结构的信息。（参见“第三分册”有关内容）典型的GC-FTIR联用仪如图 3-7 所示[27]。

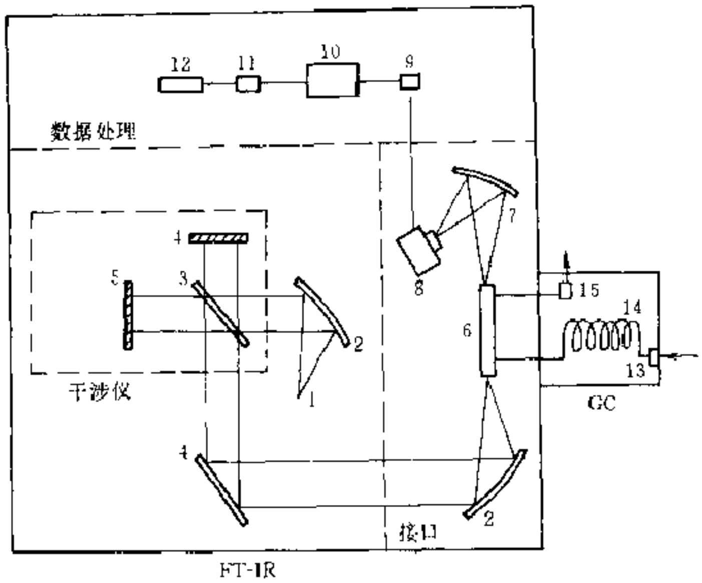


图 3-7 GC-FTIR 联用仪流程图

1—光源；2—抛物面镜；3—分束器；4—固定镜；5—移动镜；6—光管；7—椭圆面镜；8—红外检测器；9—A/D 转换器；10—微型计算机；11—D/A 转换器；12—绘图仪；13—样品气化室；14—色谱柱；15—色谱检测器

第五节 特殊用途气相色谱仪

一、裂解气相色谱仪

裂解气相色谱仪是在进样装置部分安装裂解器的气相色谱仪。裂解器的作用是在一定条

件下将聚合物热解成易挥发的小分子组分，并送至色谱柱进行分离。将所得谱图（通称裂解指纹图）与相同操作条件下已知聚合物的标准样品的裂解指纹图进行比较，遂可判断未知聚合物的种类和性质[28]。若与质谱联用，根据裂解色谱指纹图和质谱的鉴定结果，结合热裂解反应和聚合反应的知识，可进而推出聚合物的结构。

裂解技术的关键是选择适宜的裂解器。常见的裂解器有居里点裂解器、管式裂解器、热丝（热带）裂解器和激光裂解器。各种裂解器性能见表 3-6。图 3-8 是最常见的居里点裂解器结构图。

表 3-6 裂解器的性能比较[21]

特征方法	进样量/μg	试样形态的要求及限制条件	温度范围①/℃	热解单元温度控制	热解室中的催化反应	到600℃的升温时间/s	重现性	缺点	优点
试样舟	1～5000	所有形态 1. 液体 2. 固体	1500	连续可调	轻微	20～50	尚好	1. 升温时间慢 2. 进样量大 3. 不适用于毛细管柱	1. 适用于任何物质，液体或固体 2. 温度范围最宽 3. 进样量范围宽
传统热丝和金属带	10～1000	能溶解在某种溶剂中	1200	连续可调	有	5～25	尚好	1. 升温时间慢 2. 金属易变质 3. 很难应用于固体物质	1. 应用很广泛 2. 温度范围宽 3. 已商品化 4. 进样简单
电容器增压热丝	5～10	能溶解在某种溶剂中	900	连续可调	无	(7～10) ms	好	1. 固体物质必须可溶 2. 进样量必须小 3. 未商品化	1. 升温时间短 2. 温度范围宽 3. 重现性好
居里点低功率(30W～100W)	10～50	1. 能溶解在某种溶剂中 2. 某些结晶和粉末	980	限于356、480、510、600、770、980℃	有	1.5	好	1. 很难用于固体物质 2. 热解室必须加热 3. 升温时间慢	1. 温度精确 2. 重现性好 3. 已商品化
居里点高功率(>1000W)	10～50	1. 能溶解在某种溶剂中 2. 某些结晶和粉末	980	限于356、480、510、600、700、980℃	有	70ms	—	1. 很难用于固体物质 2. 热解室必须加热	1. 升温时间短 2. 温度精确 3. 重现性好 4. 已商品化
蒸气相	0.001～10	仅限于挥发性物质	800	连续	无	N/A	好	仅限于挥发性物质	1. 重现性好 2. 温度范围宽 3. 与理论相关
激光	500(或更大)	深色试样或介质	估计为10^4K	不控制	轻微	估计为10ms	尚好	1. 热解器中须加有色添加剂 2. 复杂且昂贵 3. 进样量大 4. 平衡温度比其他热解器高 5. 对实验室有危害 6. 未商品化 7. 裂解过程复杂	1. 热解色谱图可能较简单 2. 升温时间快 3. 不必热降解
带状探针	0.1～5	1. 能溶解在某种溶剂中 2. 某些粉末	1400	连续可调	轻微	10ms	好	1. 固体物质易掉落 2. 进样量必须小	1. 升温时间短 2. 温度范围宽 3. 已商品化 4. 重现性好

①表中数值是温度范围的中心值。

其次是确定终点裂解温度，升温时间或加热到终点温度的速率等色谱条件。再其次是样

品用量、厚度和颜色等。均对裂解指纹图有影响，必须在与标准指纹图完全相同的操作条件下，两种指纹图才可相比较。

目前裂解色谱已广泛用于有机硅化合物、挥发性和不挥发性的有机物、高聚物的分析，以及微生物学中细菌分类、鉴别、鉴定等一些复杂组分的分析，也可以用于沸点低于500℃，热稳定性良好、分子质量小于400的无机物的分析。有关裂解色谱更详细的介绍可查阅文献[29～32]。

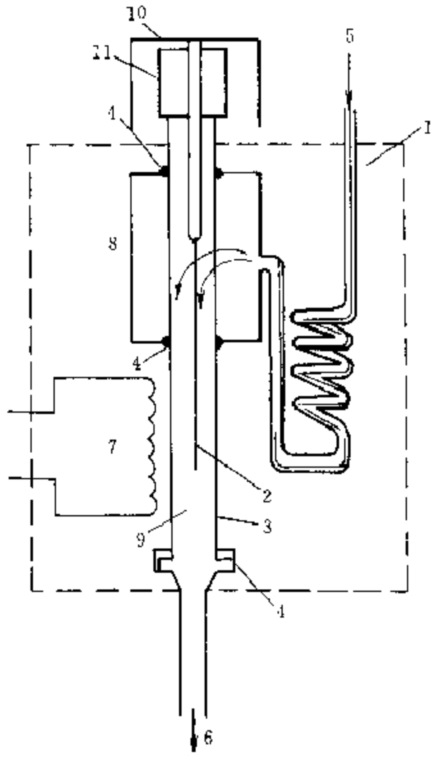


图 3-8 典型的居里点热解器示意图

1—气体预热管；2—热丝；3—石英套管；4 O型气密封圈；5—载气入口；6—气体出口（进入色谱柱）；7—射频加热线圈；8—转移口；9—热解区域；10—夹紧器；11—隔片

二、制备气相色谱仪

制备气相色谱仪是用气相色谱法制备高纯试剂（纯度＞99.99％）的一种填充柱气相色谱仪。它与用于分析目的的色谱仪主要差别在于：

①经色谱柱分离出来的单个馏分的绝大部分在冷阱中被收集下来，只有极小的一部分被送入检测器作检测、指示用。

②为了提高制备效率，要求进样量大。色谱柱在保持一定柱效情况下必须有较大的容量。

③为了自动循环操作，采用程序自动控制。

有关这方面资料可参阅文献［33、34］。其典型流程见图 3-9[11]。

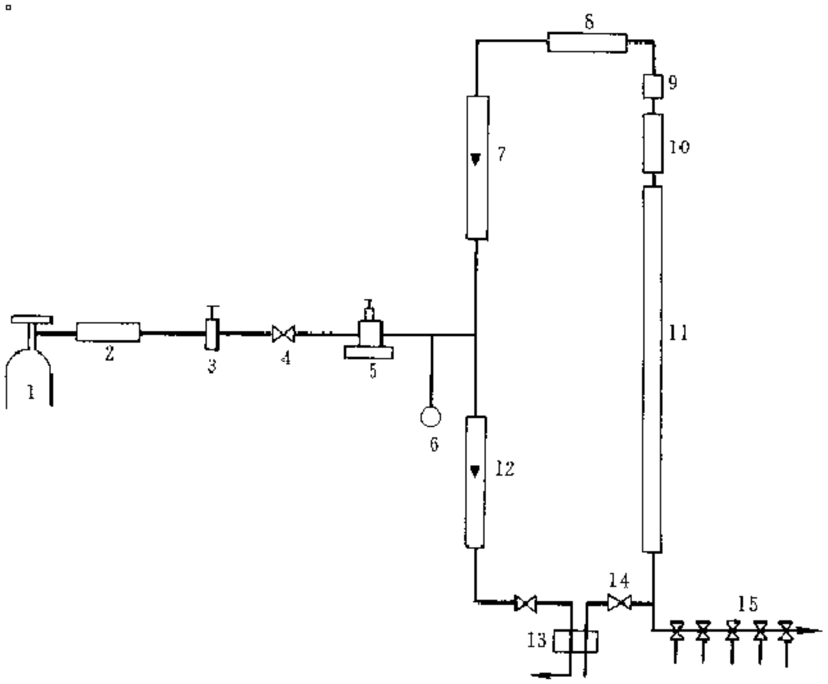


图 3-9 制备气相色谱仪流程图

1—钢瓶；2—净化器；3—减压阀；4—针形阀；5—稳压阀；6—压力计；7—流量计；8—预热器；9—止逆阀；10—气化室；11—色谱柱；12—流量计；13—检测器；14 流量控制器；15—馏分收集器

三、反应气相色谱仪

顾名思义，这是化学反应与色谱法相结合的气相色谱仪。即试样在色谱柱前、柱内或柱后的反应区进行化学反应的气相色谱仪。最常见的是在检测器前装备转化炉的（如：CO、CO_2 $\xrightarrow[H_2]{Ni}$ CH_4）色谱仪。但更典型的反应气相色谱仪是元素分析仪。它是用化学转换后与气相色谱仪联用的元素分析仪器。目前厂商已推出各种型号测定有机化合物中各种元素的色谱仪，如碳、氢、氧、氮、硫、氯、溴、磷、砷等。

有机化合物中元素的分析与气相色谱联用的实现，通常按以下程序进行：①把分析试样送入仪器；②被分析试样化学转化成简单的挥发性产物；③将生成的产物进行色谱分离；④对分离产物进行检测，并将结果进行定性、定量处理。

这方面资料可参阅文献［35］。

四、流程气相色谱仪

流程气相色谱仪是在工业生产现场每隔一定时间自动地进行分析用的工业分析仪器，它具有的特点主要为：

①样品的组成与测定范围是已知的。样品状态则多种多样，如有高温高压、常温常压或负压、含有固体悬浮物等杂质。

②仪器应能长期连续运转。要求色谱柱寿命长，各部件性能可靠，适合现场使用。

③快速给出分析结果。数据处理装置自动给出组分的浓度，最好能将相应的浓度信号送给流程调节器。

流程气相色谱仪的框图通常如图 3-10 所示。需根据样品状态与组成安装特殊的取样和样品纯化装置、分析器配备高效、耐用的色谱柱及可能需用的柱切换部件。可选用适当检测器。现在一般将程序控制器、数据处理装置、流程调节器等不再放在现场，而是移到仪表操作室，以便生产上调控。

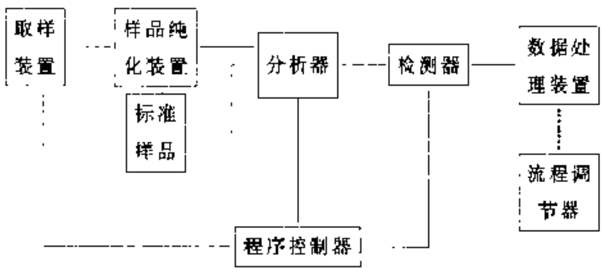


图 3-10 流程气相色谱仪框图

国内外流程气相色谱仪绝大多数用于石油炼制和石油化工生产过程。其余为化肥、金属冶炼、橡胶、合成纤维、涂料工业等。样品组成是 H_2、Ar、O_2、N_2、NH_3、CO、CO_2、H_2S、SO_2 等无机气体，C_1～C_5 气体烃，低沸点芳烃或低沸点脂肪醇化合物。

流程气相色谱仪今后的发展，会在仪器简化、专用和改进仪器可靠性方面继续作努力；将采用新的微处理机技术提高分析速度。有关材料请参阅文献［36～38］。

参 考 文 献

1 王学琳，孙淑萍．现代科学仪器，1995；(3)：6

2 Eiceman G A，Hill H H，Jr，Davani B．Anal Chem，1996；68：297R

3 Stevenson R．Am Lab，1995；(5)：26G

4 傅若农．国外分析仪器，1996；(2)：1

5 Hurrell R A．J Chrom Sci，1992；30：86

6 J Chrom Sci，1993；31（2）：10G
7 本刊编辑部．现代科学仪器，1996；（1）：11
8 中国分析测试协会咨询委员会．分析测试仪器通讯，1995；5（1）：59
9 本刊评论员．国外科学仪器，1989；（4）：6
10 Grob K. Einspritztechniken in der Kapilar-Gas Chromatographia. Bad Durkheim：Huethig，1995
11 Grob K. Anal Chem，1994；66（20）：1009A
12 Zlatkis A，Kaufman H R. Nature（london），1959；184：4010
13 Vogt W，Jacob K. In Zlatkis A，Ettre L S，ed. Advances in Chromatoraphy 1979. Bad Durkheim：Huethig，1979：225
14 薛石雷．PE 中国快讯，1995；Dec 3
15 Van Lieshout H P M，Janssen H G，Cramers C A. Am Lab，1995；27（12）：38
16 Hindshow J V. LC-GC Int，1994；7：560
17 Janak K，Colmsjo A，Ostman C，HRC，1995；18：117
18 Mol H G J，Janssen H-G，Cramers C A，et al. HRC，1995；18：19
19 Riemer D D，Milmc P J，Farmer C T，et al. Chemospere，1994；28：837
20 Buethe A，Denker E Chemospere，1995；30：753
21 Doherty S J，Winniford W L. LC-GC，1994；12：846
22 Hubbard WC，Bickel C，Schleimer R P. Anal Biochem，1994；221：109
23 Lehmann W D，Metzger D，Stephan M，et al. Anal Biochem，1995；224：227
24 Rohr V，Meckel L，Orther H M. Fresenius' J Anal Chem，1994；348：5
25 Ebdon L，Evans E H，Pretorius W G，et al. J Anal At Spectram，1994；9：939
26 周良模等．气相色谱新技术．北京：科学出版社，1994
27 李浩春，卢佩章．气相色谱法．北京：科学出版社，1993
28 May R W，Pearson E F，Scotherm D. Pyrolysis Gas Chromagraphy. London：The Chemical Society，1977
29 吴采樱，曾昭睿．现代毛细管柱色谱法．武汉：武汉大学出版社，1990
30 Stevens M P. Characterization and Analysis of Polymers by Gas Chromatogaphy. New York：Dekker，1969
31 Berezkin V G，Alishoyev V R，Nemiroskaya I B. GAs Chromatography of Polymers. New York：Elsevier，1977
32 Fisecher W G，Kusch P. LC-GC Int，1993；6：763
33 Zlatkis A，Pretorius V. Preparative Gas Chromatography. New York：Wiley-Intersci，1971
34 Rijnders G W A. Advances in Chromatography，1996；3：224
35 Rezl V，Janak J. J Chromatogr，1973；69：355
36 Miller R J. HRC，1995；18：213
37 Harter D A，Alcorn W B. Process Control Qual，1992；3（1～4）：145
38 Guillemin C L Chemon Intell Lab Syst，1992；17：201

（叶　芬）

第四章　流　动　相

第一节　载　　气

一、常用载气及性质

（一）常用载气

气相色谱法最常用的载气是氢气、氮气、氦气、氩气、二氧化碳气；还有助燃的空气。这些气体除空气可用空压机供给，氢气有时用氢气发生器供给外，一般都由高压钢瓶供给。载气需要经过净化、稳压和控制流量后才能进人色谱柱系统。

（二）载气的性质

常用载气的物化性质见表 4-1[1,2]。

表 4-1　色谱常用气体的物理化学性质[1,2]

气体	相对分子质量	熔点/℃	沸点/℃ (101.1kPa)	临界温度/℃	临界压力/kPa	密度①/ (kg·m⁻²)	粘度/ (mPa·s) (400K)	热导率 λ/ (10^{-2}W·m^{-1}·K^{-1}) (48.9℃)	电离能 E/eV	比热容 c/ (J·kg^{-1}·K^{-1})
H_2	2.016	−259.34	−252.87	−240.17	12.8×101	0.08988	0.0109	19.71	15.43	14113
He	4.003	—	−268.90	−267.96	2.26×101	0.17847	0.0243	15.74	24.59	5331
Ar	39.94	189.35	−185.87	−122.29	48.0×101	1.78370	0.0289	1.90	15.76	524
N_2	28.016	210.0	−195.80	−147.1	33.5×101	1.25055	0.0223	2.75	15.58	1031
空气	28.96	—	−194.4	−140.7	37.2×101	1.2928	0.0231	2.8	12.8	1014
CO_2	44.01	—	−78.5	31.1	32.2×101	1.97690	0.0196	1.83	13.77	837

①为 0℃，101325Pa 时的密度.

二、载气的纯化方法

在气相色谱中选用何种载气及多高的纯度，主要取决于所用检测器和色谱柱等分析条件。例如：使用氦离子化检测器时要求氦气纯度在 4 个九（99.99%）以上；用电子捕获检测器需把载气中电负性较强的组分除去，特别是氧的含量要尽量低；用氢火焰离子化检测器需把载气（以及燃气，助燃气）中的烃类有机化合物除去；用吸附剂色谱柱要求控制载气的含水量，等等。由于载气纯度对色谱分析有很大影响，因此载气在使用前要经过纯化处理，以便除去载气中水蒸气，碳氢化合物，氧气等杂质。

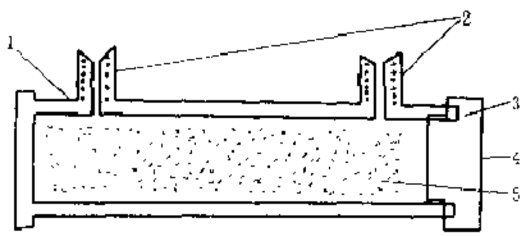


图 4-1　净化器示意图

1—净化管；2—连接螺丝；3—橡皮垫圈；4—螺旋盖；5—净化剂

常用纯化方法是在室温下，将载气先通过净化器，然后进人色谱仪柱系统。净化器结构

如图 4-1 所示，由净化管与螺旋盖组成。

净化管直径约 45mm，长约 30cm。管内装有：变色硅胶或 5A 分子筛用以除去气体中水蒸气；活性炭除去气体中的碳氢化合物；或脱氧剂（如中国科学院大连化学物理研究所生产的 401 型）除去氮气中氧气。净化管进气和出气口要用玻璃棉堵好，防止粉末吹入色谱仪气路系统。所用变色硅胶，分子筛，活性炭，脱氧剂使用前都要活化，使用后可再生，重复使用。

三、载气的选择

（一）载气与柱效

许多色谱工作者曾讨论过载气的种类与柱效的关系[3,4]，如 Nogare 等指出，依据速率理论，略去 A 项时，有

$$H=\frac{B}{\bar{u}}+(C_L+C_G)\bar{u}$$

当固定液用量较小，即 $C_L \ll C_G$ 情况时，可得

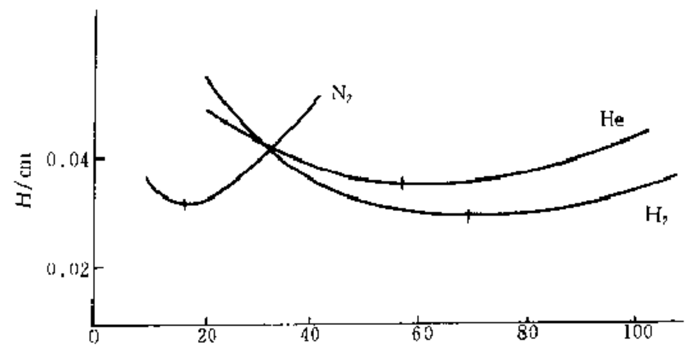
$$H_{min}=2\ (BC_G)^{1/2}$$

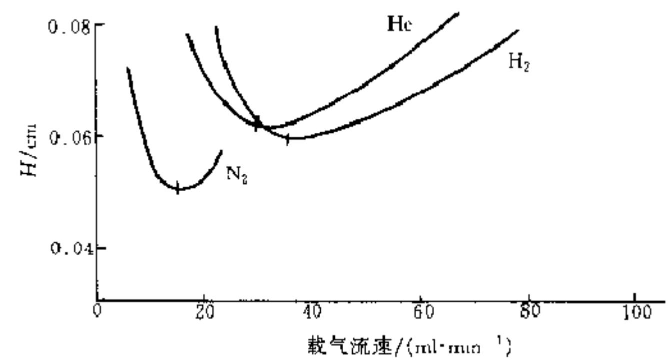
当固定液用量很多，即 C_L 项变得很重要时，可得

$$H_{min}=2\ (BC_L)^{1/2}$$

前者用相对分子质量较小的 H_2 和 He 就比用 CO_2 和 N_2 作载气为好，而后者则相反。图 4-2 是用 1，3-丁二烯在固定液含量分别为 10%和 30%测定的结果。

从图 4-2 还可以看出，载气的速度与柱效的关系。





(b)

图 4-2 不同载气与柱效的关系

(a) 固定液含量（10%）时；(b) 固定液含量（30%）时

（二）载气与检测器

色谱柱流出的载气中，随试样含量变化所形成的色谱流出曲线反映载气中组分含量随流出时间变化的过程。检测器与相适合的载气搭配，才能充分发挥检测器自身性能，使分析灵敏度达到最高，获得理想的色谱流出曲线。载气与检测器的匹配可参见表 4-2。

表 4-2　载气与检测器的匹配

载　气	使用纯度/%	匹配检测器
氢	99.99～99.9999	FID、TCD
氦	99.9999	MS，TCD，HID
氮	99.99～99.9999	FID，ECD
氩	99.9099	ECD，AID
二氧化碳	＞99.9	计氮管

第二节　载气的测量与控制

一、载气压力的测量

载气的压力可用管弹簧式压力表指示和测量。在气体流路中，连结高压气瓶的减压阀上，虽有压力表指示气瓶内气体的压力和减压后流出的气体压力，但仍需在稳压阀或稳流阀后装上一个较精确的压力表，准确指示色谱柱前或进入其他部件前的气体压力。

二、载气流量的测量

在气体流路中，需要装一个转子流量计指示气体流量。（用数字指示的稳流阀时，就不需要转子流量计。）

载气的流量可用体积流量或线速度表示。使用填充柱时，载气流量多用体积流量表示，可用皂膜流量计测定，其结构见图 4-3。

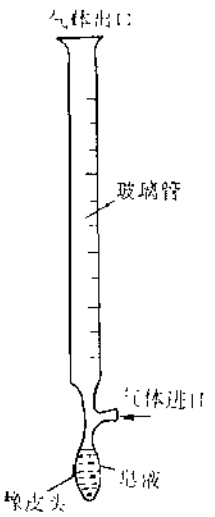


图 4-3　皂膜流量计

皂膜流量计是一个内径均匀，下端为三通管的玻璃管，三通管底部连接盛有肥皂（或十二烷基磺酸钠）水溶液的橡皮球，三通管的侧管连接色谱柱出口。测量时将载气连续地从侧管通入，然后手捏底部橡皮球使气流携带肥皂泡膜沿刻度管上升，测定泡膜通过刻度管所需时间，经过计算，就可得柱出口温度和压力下（含饱和水蒸气压）。皂膜流量计测量的载气流量（称为视体积流量 F_o）。皂膜流量计刻度管的校正方法与校正滴定管方法相同。皂膜流量计能够很精确地测定（1～50）$ml \cdot min^{-1}$的气体流量。使用时应将管内壁洗净，湿润，检查管路有无漏气，以免产生误差。

毛细管（空心柱）的载气流量较难直接测出，故常用载气流量平均线速表示（经计算后得到空心柱载气的体积流量）。

测定空心柱平均线速（$\bar{u}$）的方法是先测定出死时间。例如甲烷的保留时间 t_M(s)，除以柱长 l(cm)，得到载气平均线速（$\bar{u}$）($cm \cdot s^{-1}$)。

$$\bar{u}=\frac{l}{t_M}$$

若已知空心柱的半径 r（cm），则得柱温和柱平均压力下载气体积流量（$F/ml \cdot min^{-1}$）：

$$F=60(\pi r^2)\overline{u}$$

t_M 可由直接测量甲烷的保留时间获得；也可由同系物三个相邻组分的保留时间依下式求出[illegible]：

$$t_M=\frac{t_{R_1}t_{R_3}-t_{R_2}^2}{t_{R_1}+t_{R_3}-2t_{R_2}}$$

式中，t_{R_1}、t_{R_2} 和 t_{R_3} 是同系物中相邻的三个组分的保留时间，但选择的第[illegible]个组分以不是同系物中最初的组分为宜。

三、载气流量的校正

欲将在色谱柱（或检测器）后用连接的皂膜流量计测量所得的视体积流量 F_o，换算成色谱柱操作条件下的流量 F，则需作如下三种校正。

1. 水蒸气校正

由于载气通过皂膜流量计时，被室温的水蒸气饱和，测定的流量 F_o 是被水蒸气饱和的载气的流量，故在柱出口温度（K）和压力（不含饱和水蒸气压）的实际体积流量（F_a）的值为

$$F_a=F_o\cdot\frac{p_o-p_W}{p_o}$$

式中，p_o 是大气压力，Pa；p_W 是测量时室温下水的饱和蒸气压，Pa。水蒸气饱和蒸气压见表 4-3。

表 4-3　水蒸气饱和蒸汽压

（单位 mmHg）①

温度/℃	0.0	0.2	0.4	0.6	0.8	温度/℃	0.0	0.2	0.4	0.6	0.8
0	4.579	4.647	4.715	4.785	4.855	21	18.650	18.880	19.113	19.349	19.587
1	4.926	4.998	5.070	5.144	5.219	22	19.827	20.070	20.316	20.565	20.815
2	5.294	5.370	5.447	5.525	5.505	23	21.068	21.324	21.583	21.845	22.110
3	5.685	5.766	5.848	5.931	6.015	24	22.377	22.648	22.922	23.198	23.476
4	6.101	6.187	6.274	6.363	6.453	25	23.756	24.039	24.326	24.617	24.912
5	6.543	6.635	6.728	6.822	6.917	26	25.209	25.509	25.812	26.117	26.426
6	7.013	7.111	7.209	7.309	7.411	27	26.739	27.055	27.374	27.696	28.021
7	7.513	7.617	7.722	7.828	7.936	28	28.349	28.680	29.015	29.354	29.617
8	8.045	8.155	8.267	8.380	8.494	29	30.043	30.392	30.745	31.102	31.461
9	8.609	8.727	8.845	8.965	9.086	30	31.824	32.191	32.561	32.934	33.312
10	9.209	9.333	9.458	9.585	9.714	31	33.695	34.082	34.471	34.864	35.261
11	9.844	9.976	10.109	10.244	10.380	32	35.663	36.068	36.477	36.891	37.308
12	10.518	10.658	10.799	10.941	11.085	33	37.729	38.155	38.584	39.018	39.457
13	11.231	11.379	11.528	11.680	11.833	34	39.898	40.344	40.796	41.251	41.710
14	11.987	12.144	12.302	12.462	12.624	35	42.175	42.644	43.117	43.595	44.078
15	12.788	12.953	13.121	13.290	13.461	36	44.563	45.054	45.549	46.050	46.556
16	13.634	13.809	13.987	14.166	14.347	37	47.067	47.582	48.102	48.627	49.157
17	14.530	14.715	14.903	15.092	15.284	38	49.692	50.231	50.774	51.323	51.879
18	15.477	15.673	15.871	16.071	16.272	39	52.442	53.009	53.580	54.156	54.737
19	16.477	16.685	16.894	17.105	17.319	40	55.324	55.91	56.51	57.11	57.72
20	17.535	17.753	17.974	18.197	18.422						

①1mmHg=133.3Pa.

2. 温度的校正

经过水蒸气分压校正的载气流量 F_a，是柱出口温度（室温）和压力下的载气流量，需要

校正为柱温（炉温）的载气校正体积流量。

$$F_c = F_a \cdot \frac{T_c}{T_a}$$

式中，T_a 是柱出口温度，单位为 K；T_c 是柱温，单位为 K。

3. 压力校正

经过水蒸气分压校正和温度校正后的流量 F_c 成为载气在柱出口压力（大气压力）测定的流量，还需要校正到柱的平均压力下的载气平均体积流量。

$$F = F_c \cdot j$$

式中，j 是色谱柱压力梯度校正因子，可由下式求出：

$$j = \frac{3}{2}\left[\frac{\left(\frac{p_i}{p_o}\right)^2 - 1}{\left(\frac{p_i}{p_o}\right)^3 - 1}\right]$$

式中，p_i 与 p_o 分别是载气在色谱柱出口与柱出口的绝对压力。

j 值也可以由压力梯度校正因子表（表 4-4）查得。

表 4-4　压力梯度校正因子(j)

$\frac{p_i}{p_o}$	0.00	0.01	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07	0.08	0.09
1.00	1.000	0.9950	0.9900	0.9851	0.9803	0.9754	0.9706	0.9658	0.9611	0.9563
1.10	0.9517	0.9470	0.9424	0.9378	0.9333	0.9287	0.9242	0.9198	0.9154	0.9110
1.20	0.9066	0.9023	0.8980	0.8937	0.8895	0.8853	0.8811	0.8769	0.8728	0.8687
1.30	0.8646	0.8606	0.8566	0.8527	0.8487	0.8447	0.8408	0.8371	0.8333	0.8295
1.40	0.8257	0.8219	0.8182	0.8145	0.8109	0.8073	0.8037	0.8001	0.7965	0.7930
1.50	0.7895	0.7860	0.7825	0.7791	0.7757	0.7727	0.7690	0.7657	0.7624	0.7591
1.60	0.7558	0.7526	0.7494	0.7462	0.7430	0.7399	0.7368	0.7337	0.7306	0.7275
1.70	0.7245	0.7215	0.7185	0.7155	0.7126	0.7097	0.7068	0.7039	0.7010	0.6982
1.80	0.6954	0.6926	0.6898	0.6870	0.6843	0.6815	0.6788	0.6762	0.6735	0.6708
1.90	0.6682	0.6656	0.5630	0.6604	0.6579	0.6553	0.6528	0.6503	0.6478	0.6453
2.00	0.6429	0.6404	0.6380	0.6356	0.6332	0.6308	0.6285	0.6261	0.6238	0.6215
2.10	0.6192	0.6169	0.5146	0.6124	0.6101	0.6079	0.6057	0.6035	0.6013	0.5992
2.20	0.5970	0.5949	0.5928	0.5906	0.5885	0.5865	0.5844	0.5823	0.5803	0.5783
2.30	0.5763	0.5742	0.5723	0.5703	0.5683	0.5664	0.5644	0.5625	0.5606	0.5587
2.40	0.5568	0.5549	0.5530	0.5512	0.5493	0.5475	0.5465	0.5438	0.5420	0.5402
2.50	0.5385	0.5367	0.5349	0.5332	0.5314	0.5297	0.5280	0.5263	0.5246	0.5229
2.60	0.5212	0.5196	0.5179	0.5163	0.5146	0.5130	0.5114	0.5098	0.5082	0.5065
2.70	0.5050	0.5034	0.5019	0.5003	0.4988	0.4972	0.4957	0.4942	0.4927	0.4912
2.80	0.4897	0.4882	0.4867	0.4852	0.4838	0.4824	0.4809	0.4795	0.4781	0.4766
2.90	0.4752	0.4738	0.4724	0.4710	0.4697	0.4683	0.4669	0.4656	0.4643	0.4629
3.00	0.4615	0.4602	0.4589	0.4576	0.4563	0.4550	0.4537	0.4523	0.4511	0.4499
3.10	0.4486	0.4473	0.4461	0.4448	0.4436	0.4424	0.4411	0.4399	0.4387	0.4375
3.20	0.4363	0.4351	0.4340	0.4328	0.4316	0.4304	0.4293	0.4281	0.4269	0.4258
3.30	0.4247	0.4235	0.4223	0.4212	0.4202	0.4190	0.4179	0.4169	0.4157	0.4146
3.40	0.4136	0.4122	0.4115	0.4101	0.4092	0.4082	0.4071	0.4061	0.4050	0.4040
3.50	0.4031	0.4020	0.4010	0.3999	0.3989	0.3980	0.3969	0.3959	0.3950	0.3939
3.60	0.3930	0.3920	0.3910	0.3900	0.3891	0.3881	0.3872	0.3863	0.3852	0.3843
3.70	0.3834	0.3824	0.3815	0.3806	0.3797	0.3787	0.3778	0.3769	0.3760	0.3751
3.80	0.3743	0.3734	0.3724	0.3716	0.3707	0.3698	0.3689	0.3681	0.3672	0.3664

续表

$\frac{p_i}{p_o}$	0.00	0.01	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07	0.08	0.09
3.90	0.3656	0.3647	0.3638	0.3620	0.3621	0.3612	0.3605	0.3596	0.3588	0.3580
4.00	0.3572	0.3564	0.3555	0.3548	0.3539	0.3531	0.3523	0.3515	0.3507	0.3500
4.10	0.3492	0.3481	0.3476	0.3468	0.3461	0.3453	0.3445	0.3438	0.3431	0.3423
4.20	0.3416	0.3408	0.3401	0.3393	0.3385	0.3378	0.3371	0.3363	0.3356	0.3350
4.30	0.3342	0.3335	0.3328	0.3321	0.3314	0.3306	0.3300	0.3295	0.3285	0.3278
4.40	0.3271	0.3265	0.3258	0.3251	0.3245	0.3237	0.3231	0.3224	0.3217	0.3211
4.50	0.3204	0.3198	0.3191	0.3185	0.3178	0.3171	0.3165	0.3158	0.3152	0.3146
4.60	0.3140	0.3132	0.3126	0.3120	0.3114	0.3108	0.3101	0.3095	0.3089	0.3083
4.70	0.3077	0.3071	0.3065	0.3059	0.3052	0.3046	0.3040	0.3034	0.3029	0.3025
4.80	0.3017	0.3011	0.3005	0.2999	0.2994	0.2987	0.2982	0.2976	0.2970	0.2961
4.90	0.2960	0.2954	0.2948	0.2942	0.2937	0.2931	0.2925	0.2919	0.2915	0.2909
5.00	0.2903	0.2898	0.2892	0.2888	0.2882	0.2876	0.2871	0.2866	0.2860	0.2855
5.10	0.2850	0.2844	0.2840	0.2834	0.2829	0.2823	0.2819	0.2813	0.2808	0.2803
5.20	0.2798	0.2793	0.2787	0.2783	0.2778	0.2772	0.2768	0.2762	0.2757	0.2753
5.30	0.2748	0.2743	0.2738	0.2733	0.2729	0.2724	0.2719	0.2714	0.2709	0.2704
5.40	0.2700	0.2695	0.2690	0.2685	0.2681	0.2676	0.2672	0.2667	0.2663	0.2658
5.50	0.2654	0.2649	0.2645	0.2640	0.2636	0.2631	0.2627	0.2621	0.2618	0.2612
5.60	0.2608	0.2604	0.2600	0.2595	0.2591	0.2586	0.2582	0.2577	0.2573	0.2568
5.70	0.2564	0.2561	0.2556	0.2552	0.2548	0.2543	0.2540	0.2535	0.2531	0.2526
5.80	0.2523	0.2519	0.2514	0.2510	0.2507	0.2502	0.2498	0.2494	0.2490	0.2486
5.90	0.2482	0.2478	0.2474	0.2469	0.2466	0.2452	0.2457	0.2454	0.2450	0.2446
6.00	0.2442	—	—	—	—	—	—	—	—	—

顺便指出，若用 u_o 表示柱出口处载气线速，则有

$$u_o=\frac{F_a}{\varepsilon q}$$

式中，ε 为柱内颗粒的孔隙率，q 是柱的横截面积。当色谱柱是涂壁空心柱时，因 $\varepsilon=1$，则有

$$u_o=\frac{F_a}{q}$$

用色谱柱压力梯度校正因子校正的压缩性，柱内载气的平均线速为

$$\bar{u}=j\,u_o$$

四、载气流量的控制

传统的载气流量控制方法是用减压阀将高压气瓶中气体的压力降至（200～500）kPa（比柱进口压力至少高 100kPa），然后再经过针形阀、气体净化器、气体稳压阀，使气体能以稳定的压力输入色谱仪。由于程序升温时炉温不断变化，为使通过色谱柱的载气质量流量不变，在气体稳压阀的后面还要连接气体稳流阀。经过这些阀件后，气体流量的变化一般可控制在 1.5％以内。

稳压阀在气路系统中用于调节气体流量和稳定流程中的气体压力。其工作原理图见图 4-4。

当阀针开启一定位置且系统内的气压达平衡后，如果出口压力发生微小变化时，随即 B 腔气压发生变化，那么，波纹管则发生伸长或收缩作用，此时经连动杆也就调整了阀针与阀座之间的间隙，从而使系统内的压力恢复到原有的平衡状态。

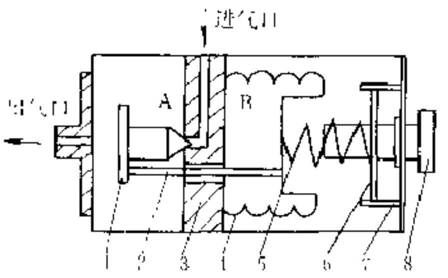


图 4-4 稳压阀工作原理图

1 阀针；2—连动杆；3—阀体；4—波纹管；5 压簧；6 滑板；7—滑杆；8—调节手柄

稳压阀的入口压力一般不得超过 0.6MPa，出口压力在（0.05～0.3）MPa 范围内能获得最佳的稳压效果。一般进口压力必须＞0.02MPa，进出口压差必须大于 0.05MPa。稳压阀一般在出厂时已调好，用户不必再变动。

稳流阀为膜片反馈式，其工作原理图见图 4-5。当稳流阀的阀针开启一定位置，并且气体入口和出口压力恒定时，出口流量则恒定，若阀针位置一定且入口压力恒定，而出口压力发生变化时，则阀针的入口与出口间的气压发生变化，也即膜片上的作用力发生变化，此时也就改变了硅胶阀盖与阀座之间的间隙，从而使气体流量维持在给定值。

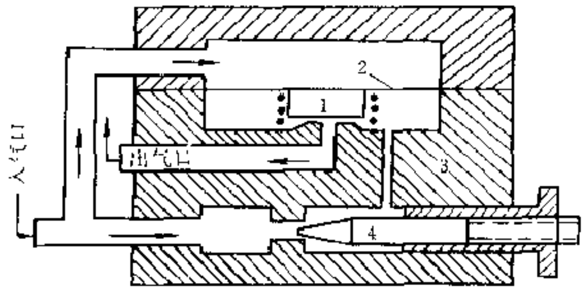


图 4-5 稳流阀工作原理图

1—硅橡胶；2—膜片；3—阀体；4—阀针

稳流阀的入口压力一般不宜超过 0.25MPa，出口压力控制在（0.02～0.2）MPa 范围内能获得较好的稳流效果，一般进出口压差必须大于 0.05MPa。

如今国外色谱公司对气流系统的测控不断有新的发展。现在 Hewlett-Packard 公司宣称其 HP6890 型气相色谱仪采用了电子气路控制技术（electronic pneumatric control）。即将气路测量控制的部件集成至一整体气路控制模块“集成气路”中，模块上的传感器可根据周边环境气压及室温变化自动进行补偿和校准各气路压力、流量、分流比及柱线速等参数，从而实现这些参数数字化调节和程序控制。这样可使色谱分析重现性更好并节省气体费用。Perkin-Elmer 公司宣称其 Autosystem XL 型气相色谱仪采用了无旋钮和程序化全气路控制系统（PPC™），可控制、监视和检测载气流路、进样口、分流出口和检测器气体流路，对环境温度与压力变化可予以自动补偿；能实施电子程序压力控制、电子程序流量控制、电子程序线速度控制、恒温操作控制等模式。这些成果在实践中不断改进后，会使气相色谱气路的测控方法产生许多重要的具有实用价值的变化。

参 考 文 献

1 Perry R H. Perry's Chemical Engineers' Handbook. 5th ed. New York：Mc Graw-Hill Co，1984

2 Lide D R. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 73rd ed. Florida：CRC Press，1992

3 Nogare S D，Juvet R S，Jr. Gas-Liquid Chromatography. New York：Intersci；1962；159

4 Loyd R J，Ayres B O，Karasek F W. Anal Chem，1960；32；698

5 Petreson M L，Hirsch J. J Lipid Res，1959；1；132

6 李浩春，卢佩章．气相色谱法．北京：科学出版社，1993

（修振佳　程悦生）

第五章 固 定 相

气固色谱法和气液色谱法的固定相不相同，分别是固体固定相和液体固定相。后者品种多、应用范围广泛，前者相形见绌；而前者对气体和低沸点化合物分离的优越性能，都是后者所不及。这两种固定相彼此不能取代，仍必将长期并存。

第一节 固体固定相

固体固定相有两类，一是由无机材料制成（包括以其为基质用化学键合方法制备的键合固定相），另一是有机化合物聚合制成。在使用固体固定相时，应注意四个方面：

①使用前要进行活化，使用时要避免一些有反应性或腐蚀性气体使之失活。

②对组分吸附性太强时，会发生不可逆吸附，组分就会滞留不出。

③进样量甚少才可减小等温吸附线非线性造成的色谱峰不对称。

④应尽量使用同批产品，免除产品制备重复性差导致的色谱性能差异（特别是无机材料制成的产品）。

顺便指出，可以将少量固定液涂渍在固体固定相表面上，使其选择性有某些改变，而有利于特定组分的分离。

一、无机吸附剂

无机材料制成的吸附剂，用于色谱法的有分子筛，硅胶，氧化铝和碳素。

（一）分子筛

分子筛是人工合成的硅铝酸盐，化学组成是 $[M_2M']O \cdot Al_2O_3 \cdot xSiO_2 \cdot yH_2O$，其中 M 为 Na^+、K^+、Li^+ 等一价阳离子，M′是 Ca^{2+}、Ba^{2+}、Sr^{2+} 等两价阳离子，分子筛 Na 型与 Ca 型之分在于前者¼～¾的 Na^+ 被 Ca^{2+} 置换；X、Y 型之分是 Al_2O_3 与 SiO_2 的比例有不同；而其中数字则表明平均孔径的大小（单位为 Å），气相色谱法最常用的分子筛为 5A 与 13X 型分子筛；活化方法是在 550 ℃活化 2h，（或在减压下于350℃活化 2h）。要注意分子筛易吸水而失活。（可在250℃通载气一夜除去此吸附水），5A 和 13X 分子筛都能在室温分离开 H_2、O_2、N_2、CH_4、CO（但不能同时分离 CO_2，因其对 CO_2 不可逆吸附）；5A 分子筛适于分离 Ar 与 O_2，13X 分子筛则特别适于 C_6～C_{11}烃的族分析。

分子筛的分离机理，有两种解释。一种认为与组分的分子大小有关。例如分子直径小于 5×10^{-8}cm 者，可扩散进入 5A 分子筛的孔内而被滞留，较大的分子未滞留就很快流出，分子筛起了筛分的作用。另一种认为与分子筛的表面上的吸附动力学有关，分子筛表面积较大，极性较强，主要在表面发生吸附的作用。不同分子筛可吸附的物质如表 5-1。商品分子筛有关的数据列在表 5-2。

（二）硅胶

硅胶由硅酸凝胶制成，化学成分是 $SiO_2 \cdot nH_2O$，品种有粗孔与细孔之分；气相色谱法多用粗孔硅胶，分析 C_1～C_4 烷烃和 SO_2、H_2S、COS、SF_6 等气体硫化物。新购入的硅胶要用（1+1）盐酸浸泡 2h，然后用水洗涤至无 Cl^-。使用前于 160 ℃左右活化 2h，再生时可不用盐

酸处理。硅胶的色谱性能由其孔径大小和含水量决定。鉴于无定形的凝胶很难重复制备，后来改变制备方法获得球形多孔硅球，可较好地控制其孔径大小与表面积。国产DG系列和国外Porasil系列等产品就是这种改进的产品，见表5-3。

表5-1 分子筛的吸附能力与应用范围

分子筛	可吸附的物质①	应用范围
4A	He, Ne, Ar, Kr, Xe, H_2, O_2, N_2, CH_4, CO, CO_2, H_2O, NH_3, H_2S, CS_2, N_2O_2, C_2H_6, C_2H_4, C_2H_2, CH_3OH, CH_3CN, CH_3NH_2, CH_3Cl, CH_3Br	除去有机溶剂中微量水； 分离C_2H_6、C_2H_4与C_3H_8； 分离C_2H_6与相对分子质量更大的正构烷烃
5A	C_3H_8, C_4以上正构烷烯烃, C_2H_5Cl, C_2H_5OH, CH_2Cl_2及4A分子筛可吸附者	分离正构烷烃与异构烷烃； 分离正构烷烃与环烷烃、芳烃； 分离正构烷、烯烃与醇类、酮类、醚类、卤代烃； 分离He、H_2、Ar、O_2、Kr、N_2、CH_4、Xe； 分离H_2、O_2、N_2、CH_4、CO； 分离He、Ne、H_2、O_2、N_2； 分离SF_6、Ne、H_2、O_2、N_2
13X	异构烷烯烃、异构醇类、苯类、环烷类及5A分子筛可吸附者	分离环烷、异构烷烃、正构烷烃； 分离Ar、N_2、Kr、CH_4、CO、Xe； 分离He、H_2； 分离H_2、O_2、N_2、CH_4、CO； 分离O_2、N_2、NO、CO

①其中有些物质属于不可逆吸附。

表5-2 分子筛吸附剂

名称	结构说明	比表面积/$m^2 \cdot g^{-1}$	孔径/nm	最高使用温度/°C	供应者	备注
3A	$K_{1.2}Na_{4.8}[Al_2O_3 \cdot SiO_2]_{12} \cdot nH_2O$	—	0.32~0.33	550	大连化学物理研究所	吸水量>21(g·g^{-1})，堆积密度≈0.74g·ml^{-1}
4A	$Na_2O \cdot Al_2O_3 \cdot 2SiO_2 \cdot 4.5H_2O$	—	0.42~0.47	550	大连化学物理研究所	同3A分子筛
5A	$Ca4.5Na_3[Al_2O_3 \cdot SiO_2]_{12} \cdot nH_2O$	—	0.49~0.55	550	大连化学物理研究所	同3A分子筛
13X	$Na_{86}[(Al_2O_3)_{86}(SiO_2)_{106}] \cdot nH_2O$	—	0.8~0.9	550	大连化学物理研究所	同3A分子筛
3A	(KA型) $K_2O \cdot Al_2O_3 \cdot 2SiO_2 \cdot nH_2O$	500~700	0.32	400	大连催化剂厂，上海试剂厂	吸水量20%
4A	(NaA型) $Na_2O \cdot Al_2O_3 \cdot 2SiO_2 \cdot nH_2O$	≈800	0.48	400	大连催化剂厂，上海试剂厂	吸水量22%
5A	(CaA型) $Ca_6[Al_2O_3 \cdot SiO_2]_{12} \cdot nH_2O$	750~800	0.55	400	大连催化剂厂，上海试剂厂	吸水量21.6% 堆积密度0.67g·ml^{-1}
10X	(CaX型) $Ca_{48}[Al_2O_3 \cdot SiO_2]_{96} \cdot nH_2O$	1030	0.9	400	大连催化剂厂，上海试剂厂	—
13Y	(NaX型) $Na_2O \cdot Al_2O_3 \cdot 2.5SiO_2 \cdot nH_2O$	1030	0.10	400	大连催化剂厂，上海试剂厂	吸水量28.6% 堆积密度0.6g·ml^{-1}
NaY	(NaY型) $Na_2O \cdot Al_2O_3 \cdot (3\sim6)SiO_2 \cdot nH_2O$	—	0.9~0.10	400	大连催化剂厂，上海试剂厂	—

续表

名　称	结构说明	比表面积/ $m^2 \cdot g^{-1}$	孔径/ nm	最高使用温度/℃	供应者	备　注
CaY	(CaY 型) $CaO \cdot Al_2O_3 \cdot (3\sim6)SiO_2 \cdot nH_2O$		0.9～0.10	400	大连催化剂厂，上海试剂厂	—
1409 吸附剂	分子筛为基质的改性吸附剂	—		400	大连催化剂厂	活化方法同分子筛
Linde 3A	(KA 型)	500～700	0.32	400	Linde	
Linde 4A	(NaA 型)	800	0.48	400	Linde	
Linde 5A	(CaA 型)	750～800	0.55	400	Linde	
Linde 10X	(CaX 型)	1030	0.9	400	Linde	
Linde 13X	(NaX 型)	1030	0.10	400	Linde	
Linde NaY	(NaY 型)	—	0.9～0.10		Linde	
Linde CaY	(CaY 型)	—	0.9～0.10	—	Linde	
Linde KL	(KL 型) $K_2O \cdot Al_2O_3 \cdot (3\sim6)SiO_2 \cdot nH_2O$	—		—	Linde	
Linde KF	(KF 型) $6K_2O \cdot 6Al_2O_3 \cdot 12SiO_2 \cdot nH_2O$	—		—	Linde	
Davison 3A	(KA 型)	—	0.3	400	美国	
Davison 4A	(NaA 型)	—	0.4	400	美国	
Davison 5A	(CaA 型)	—	0.5	400	美国	
Davison 10A	(NaX 型)		0.10	400	美国	相当于 13X 型
Siliporite K-1	(NaA 型)	—	—	—	法国	Siliporite K-10 也属此类
Siliporite K-2	(CaA 型)	550	—	—	法国	
Siliporite K-3	(KA 型)	—	0.3	—	法国	Siliporite K-30 同属此类型
Siliporite K-20	(CaA 型)	600	—	—	法国	
Zeolit KA(3A)	(KA 型)	—	0.3	—	前苏联	
Zeolit NaA(4A)	(NaA 型)	—	0.4	—	前苏联	
Zeolit CaA(5A)	(CaA 型)	—	0.5	—	前苏联	
Zeolit CaX(10X)	(CaX 型)	—	0.8	—	前苏联	
Zeolit NaX(13X)	(NaX 型)	—	0.10	—	前苏联	
Zeolon Na	(NaA 型)	—	—	—	美国	类似丝光沸石
Zeolon H	含 H 离子的分子筛	500	—	—	美国	类似丝光沸石

表 5-3　硅胶吸附剂

名　称	结构说明	比表面积/ $m^2 \cdot g^{-1}$	孔径/ nm	最高使用温度/ ℃	供应者	备　注
硅胶	细孔胶态硅胶	500～600	40～50	500	国产	
硅胶	粗孔胶态硅胶	<300	80～100	500	国产	
DG-1	球形多孔二氧化铝	350～500	—	—	天津试剂二厂	相当 Porasil A
DG-2	球形多孔二氧化铝	125～250	—	—	天津试剂二厂	相当 Porasil B
DG-3	球形多孔二氧化铝	50～100	—	—	天津试剂二厂	相当 Porasil C
DG-4	球形多孔二氧化铝	25～45	—	—	天津试剂二厂	相当 Porasil D
Porasil A	球形多孔二氧化硅	350～500	<10	400	Waters Associates	分离永久气体
Porasil B	球形多孔二氧化硅	125～250	10～20	400	Waters Associates	分离永久气体

续表

名　称	结构说明	比表面积/ $m^2 \cdot g^{-1}$	孔径/ nm	最高使用温度/ ℃	供应者	备　注
Porasil C	球形多孔二氧化硅	50～100	20～40	400	Waters Associates	分离低级烃类
Porasil D	球形多孔二氧化硅	25～45	10～80	400	Waters Associates	分离低级烃类
Porasil E	球形多孔二氧化硅	10～20	80～150	400	Waters Associates	分离高沸点化合物
Porasil F	球形多孔二氧化硅	2～6	>150	400	Waters Associates	分离高沸点化合物
Porasil S	球形多孔二氧化硅	300			Waters Associates	
Silica Gel Grede 12	胶态硅胶	—	—	—	美国	分析永久气体及低沸点烃
Silica Gel Grede 15	胶态硅胶	—	—	—	美国	分析永久气体及低沸点烃
Chromosil 310	多孔硅球	～500	—	100	Supelco	专用于 COS、H_2S、CS_2 和 SO_2 的分离，堆积密度 0.39g・cm^{-3}
Chromosil 330	多孔硅球	～450	—	100	Supelco	专用于 COS、H_2S、CS_2、SO_2 和 Mercaptans 的分离堆积密度 0.38g・cm^{-3}
Spherosil XOA 400	球形多孔二氧化硅	350～500	<10	600	Pechiney-Saint Gabain	分离 CO、CO_2、C_1～C_2 烃
Spherosil XOA 200	球形多孔二氧化硅	125～250	22.5	600	Pechiney Saint Gabain	分离永久性气体、C_4 烃
Spherosil XOB 075	球形多孔二氧化硅	50～100	22～49	600	Rhone-Poulene	分离低级芳烃、环烷烃、卤代烃
Spherosil XOB 030	球形多孔二氧化硅	25～45	71	600	Analabs	分离低级芳烃、烷烃
Spherosil XOB 015	球形多孔二氧化硅	10～20	118～140	600	Analabs	分离高沸点化合物
Spherosil XOC 005	球形多孔二氧化硅	2～6	900	600	Analabs	分离高沸点烃、低沸点卤代烃

产品 Chromosil 是为了分析硫化物而开发的，表 5-4 中列有一些组分在其上于 40 ℃的保留指数。

表 5-4　含硫化合物保留指数[11]

组　分	色谱柱① A	B	C	D	E	F
甲烷	100	100	100	100	100	100
六氟化硫	—	—	-	105	200	—
乙烷	200	200	200	200	200	200
乙烯	239	200	174	167	200	186
丙烷	300	300	300	300	300	300
丙烯	406	310	294	289	317	296
硫化氢	364	310	174	78	327	257
硫化羰	343	291	245	151	327	284
异丁烷	391	375	375	377	348	—
正丁烷	400	400	400	400	400	400
1-丁烯	510	410	386	384	407	400
顺-2-丁烯	562	415	417	415	433	—
反-2-丁烯	548	415	417	415	433	-
二氧化硫	539	—	254	187	445	355
异丁烯	406	400	396	397	445	--
正戊烷	500	500	500	500	500	500
甲基硫醇	—	443	298	235	507	500

组　分	色谱柱① A	B	C	D	E	F
异戊烷	489	485	474	472	507	—
1-戊烯	—	507	483	480	507	488
2-甲基戊烷	—	580	--	—	537	585
乙基硫醇	—	529	390	343	588	400
正己烷	600	500	600	600	500	600
1-己烯	—	507	571	—	504	600
二甲硫	—	513	395	349	611	500
二硫化碳	450	472	406	357	617	488
正丙基硫醇	—	631	490	474	656	618
2,4-二甲基戊烷	—	652	—	-	660	668
二乙硫	--	—	566	—	696	—
正庚烷	700	700	700	700	700	700
正丁基硫醇	—	734	580	502	702	735
二甲二硫	—	743	536	—	736	735
甲苯	—	773	—	—	741	751
正辛烷	800	800	800	800	800	800

①色谱条件：

柱	固定相	柱尺寸	载气(He)流量/ml·min⁻¹	柱温
A	Chromosil 310	1.8m×3mm	30	40℃
B	Chromosil 330	1.8m×3mm	15	40℃
C	Carbopack B HT 100	1.4m×3mm	20	35℃(2min)→100℃，4℃·min⁻¹
D	Carbopack B/1.5%×E·60/1.0%H_3PO_4	1.8m×3mm	25	50℃(2min)→100℃，4℃·min⁻¹
E	Polyphenyl ether/Chromosorb T	11m×2mm	100	35℃(2min)→100℃，4℃·min⁻¹
F	Supelpak S	5.5m×3mm	40	40℃(1min)→200℃，4℃·min⁻¹

由于硅胶的吸附性能很强，应用范围受限，故而Halasz等[1~2]以前述多孔硅珠为基质，用多种有机化合物的官能团与其表面的羟基进行化学键合反应，制得新型的键合固定相（见表5-5）。因键合的官能团不同，键合的方法不同，所得键合固定相的选择性就有所不同，于是应用范围比硅胶广泛。

表 5-5　化学键合固定相

名　称	官能团	基质	比表面积/$m^2·g^{-1}$	最高使用温度/℃	供应者	应用范围
HDG-201A	苯基异氰酸酯	DG-2	–	60	天津试剂二厂	分析低沸点烷、烯、炔烃、CO_2
HDG-201B	苯甲醇	DG-2	—	—	天津试剂二厂	
HDG-202A	十二醇	DG-2	—	120	天津试剂二厂	
HDG-202B	十八醇	DG-2	—	—	天津试剂二厂	
HDG-203A	聚乙二醇 400	DG-2	—	135	天津试剂二厂	分析低沸点烃，有机含氧化合物，卤代烃
501 键合型硅胶	聚乙二醇 400	硅胶	--	150	上海试剂一厂	脂肪酸分析
502 键合型硅胶	辛醇	硅胶	—	160	上海试剂一厂	低沸点烃分析
Durapak-ODPN/Porasil C	氧二丙腈	Porasil C	50	150	Waters Associated Inc.	C_1～C_3 烃、酯、醚、酸、饱和与不饱和烃的分析
Durapak-PEG 400/Porasil C	聚乙二醇 400	Porasil C	50	180	Waters Associated Inc.	分析脂肪酸、醇、酮、醛、烃
Durapak-PEG 400/Porasil S	聚乙二醇 400	Porasil S	300	200	Waters Associated Inc.	分析脂肪酸、醇、酮、醛、烃
Durapak-PEG 400/Corasil	聚乙二醇 400	Corasil	—	—	Waters Associated Inc.	分析脂肪酸、醇、酮、醛、烃
Durapak-PEG 4000/Porasil S	聚乙二醇 4000	Porasil S	300	200	Waters Associated Inc.	分析极性化合物
Durapak-*n*-octane/Porasil C	正辛烷	Porasil C	50	175	Waters Associated Inc.	分析低沸点烃
Durapak-Phenyl isocyanate/Porasil C	苯基异氰酸酯	Porasil C	50	60	Waters Associated Inc.	烃类异构体
Bondapak-C_{18}/Corasil	十八烷	Corasil	—	320	Waters Associated Inc.	分析 C_5～C_{10}烃
Bondapak-phenyl/Corasil	苯基	Corasil	—	—	Waters Associated Inc.	分析 C_5～C_{16}烃
Durapak 3-hydroxypropionitrile/Porasil C	3-羟基丙腈	Porasil C	50	180	Waters Associated Inc.	
Ultra-Bond 20M	聚乙二醇 20M	硅胶	—	250	Alltech	分析氨基甲酸酯
Chemipack C18	十八醇	硅胶	—	320	Alltech	分析溶剂类
GC-Bondapack	十八醇	Porasil C	50	200	Alltech	分析芳烃、农药
Durapak-PEG 400/Porasil F	聚乙二醇 400	Porasil F	6	200	Alltech	分析多核芳烃甾族化合物

（三）氧化铝

氧化铝的化学组成是 Al_2O_3，其晶型有五种，气相色谱法常用的为 γ 型，其次为 α 型，分析 C_1～C_3 烃类异构体。使用前需在（450～1350）℃活化 2h。氧化铝的含水量与晶型有关，且决定其色谱性能，故在使用时要注意其水分含量有无变化，使性能稳定。表 5-6 列出一些商品氧化铝的有关数据。

氧化铝属中等吸附性，以往常涂渍少量固定液或无机物使其改性。如 Al_2O_3/KCl 柱可分析低沸点烃中痕量 C_1～C_4 烃和 C_1～C_{10} 碳氢化合物，扩大了分析范围。

表 5-6 氧化铝吸附剂

名称	结构说明	比表面积/$m^2\cdot g^{-1}$	孔径/nm	最高使用温度/℃	供应者	备注
氧化铝	γ 型、α 型	200～300	—	500	国产	分析低沸点烃
Alumino silica gel	硅铝胶	<100	70～250	—	美国	化学组成类似分子筛的胶态物质
Baymal	丝状氧化铝	—	—	—	美国	
Boehmite	纤维状氧化铝	～275	—		美国	
fibrillar alumina	丝状氧化铝		—	—	美国	
Alumina F-1		—	—		美国	体积密度 $1.01g\cdot cm^{-3}$
Unibeads A	球形活性氧化铝	—	0.8	400	美国	体积密度 0.72g/ml，柱压降较小，柱效较高
Alusil	硅铝胶	—	—	—	英国	
Алюмосиликагель AC-1	细孔硅铝胶	70	70	500	前苏联	600℃活化后使用
Алюмосиликагель AC-2	细孔硅铝胶	45	250	500	前苏联	600℃活化后使用

（四）碳素

碳素的化学组成是碳，气相色谱法使用的有活性炭、碳分子筛及石墨化炭黑。

活性炭由果壳或木材烧制而成，结构为无定形碳（微晶碳），用于分析永久性气体及 C_1～C_2 烃类。新购的活性炭要用等体积的苯冲洗 3 次，通空气吹干后，改用水蒸气于 450℃活化 2h，降温至150℃用空气再吹干。再生时可不用苯处理。活性炭制备重复性差，色谱性能难重复；其吸附性能强，使分离的组分拖尾严重，虽加少量固定液可削尾，但应用仍受限制。

碳分子筛是将聚偏二氯乙烯高温热解灼烧后得到的残留物，活化方法为在 180 ℃通氮气 4h，特别适于分析永久性气体、水、低沸点烃、低沸点极性化合物；如用 Carbosieve B，从室温程序升温至175℃可将 O_2、N_2、CO、CH_4、CO_2 同时分离开；并特别适于分析在有机物之前流出的微量水。

石墨化炭黑是炭黑在惰性气体中于（2500～3000）℃煅烧而成的结晶形碳。活化方法与活性炭相同。石墨化炭黑的吸附能力主要由于色散力，其很大程度取决于其表面和被吸附分子间的距离，所以石墨化炭黑颇适合分离几何结构和极化率上有差异的分子。不同品种的石墨化炭黑可分别用于分析 C_1～C_6 醇、酮、酸、酚、胺和硫化合物。如用 Carbopack C 或 F-SL 可将 8 个 C_5 醇异构体分离开；用 Carbograph 1SC 可把 SF_6、SO_2、H_2S、COS、硫醇、二硫化合物很好地分离开。石墨化炭黑的吸附性能比活性炭小，最好在分析酸性物质时，用磷酸作削尾处理；分析碱性物质时，用碳酸钠处理。还可以用苦味酸、Carbowax 1500，Carbowax 20M 改性。商品碳素吸附剂的情况列入表 5-7。

表 5-7 碳素吸附剂

名 称	结构说明	比表面积/ $m^2 \cdot g^{-1}$	最高使用温度/ ℃	视密度/ $g \cdot cm^{-3}$	孔径/ nm	供应者	应用范围
活性炭	炭(微晶碳)	400~500	<300	—	—	国产	
TDX-01	碳分子筛	800	>500	0.6 (堆积密度)	1.5~2.0	天津试剂二厂	适于分离各种气体及 C_1~C_4 烃
TDX-02	碳分子筛	—		—		天津试剂二厂	
TDX-02B	碳分子筛	—	—	—	—	天津试剂二厂	
TDX-03	碳分子筛	—	—	—		天津试剂二厂	
Carbosieve B	碳分子筛	100	400	0.12~0.14	—	Supelco	
Carbosieve C	碳分子筛	560	—	0.5~0.7	—	Supelco	
Carbosieve G	碳分子筛	910	225	0.24		Supelco	用于 C_1~C_3 烃分离
Carbosphere	碳分子筛	1000	—	—	1.3	Chrompack	分析乙烷中微量甲烷、乙炔、乙烯及空气中 CO、CH_4、CO_2
Carboxen-1000	碳分子筛	>1200	225	0.44	7.0	Supelco	永久性气体、低沸点烃、低沸点极性化合物,代替 Carbosieve S Ⅱ
Carboxen-1004	碳分子筛	1100	225	0.45	—	Supelco	永久性气体、低沸点烃、低沸点极性化合物、代替 Carbosieve S-Ⅱ
Sterling FT2700	石墨化炭黑	89.4	500	—	—	Cabot Corp	
Sterling FT 2800	石墨化炭黑	89.4	500	—	—	Cabot Corp	
Sterling MT3100	石墨化炭黑	7.6	500	—	—	Cabot Corp	
Carbopack B	石墨化炭黑	100~110	>500	0.34		Supelco	分析 C_1~C_{10} 醇、胺、酮、酸、烃类
Carbopack BHT	石墨化炭黑	100	225	0.38	—	Supelco	用氢脱活,分析气体硫化物
Carbopack C	石墨化炭黑	9~12	>500	0.66	—	Supelco	C_1~C_5 醇,低沸点酮,酯
Carbopack CHT	石墨化炭黑	10	225	0.72	—	Supelco	用氢脱活
Carbopack F-SL	石墨化炭黑	6	250	—	—	Supelco	C_1~C_5 醇、低沸点酮、酯
Carbograph 3	石墨化炭黑	8	—	—	—	Alltech	类似 Sterling MT 快速分析
Carbograph 1	石墨化炭黑	90	—	—	—	Alltech	类似 Vulcan、Spheron、carbopack B
Carbograph 1SC	从 Carbograph 1 制备	—	—	—	—	Alltech	专用于 SF_6、SO_2、H_2S、COS、硫醇、二硫化合物分析,类似于 Carbopack BHT
Carbograph 2	石墨化炭黑	12	—	—	—	Alltech	类似于 Sterling FT 或 Carbopack C,用于挥发性化合物分析
Graphac GB	石墨化炭黑	100~110	—	—	—	Alltech	非极性,可用<0.2%的固定液使其改性
Graphac GC	石墨化炭黑	10~13	—	—	—	Alltech	
Garbochrom 1	石墨化炭黑	7~10	—	—	—	前苏联	
Garbochrom 2	石墨化炭黑	80~100	—	—	—	前苏联	

二、多孔聚合物

多孔聚合物是Hollis等[1,2]最早开发的有机化合物吸附剂，由苯乙烯或乙基乙烯苯等单体与交联剂二乙烯苯交联共聚而成。而不同的单体及共聚条件可得多种不同极性与物理结构的聚合物小球；因品种多，可分离的化合物类别也就增多，扩大了原有吸附剂的应用范围。这类产品粒度均匀，形状规则，不易破碎，便于填充成为高效能的色谱柱。

国外曾广泛使用Chromosorb和Porapak两个系列的产品（国产的GDX系列，上海试剂厂生产的40X系列产品与其类似），新产品有Hayesep系列等问世。表5-8列出这些产品的规格和性能，如Hayesep A可在室温分离N_2、O_2、Ar、CO；Hayesep R可用于测定HCl、Cl_2中痕量水等等。其色谱峰形尖陡、对称。一些组分的保留值数据收集在表5-9至表5-22中。

表5-8　多孔聚合物吸附剂

名　称	结构说明	供应者	堆密度/g·cm⁻³	比表面积/$m^2 \cdot g^{-1}$	孔径/nm	颜色	极性①	最高使用温度/℃	应用范围
GDX-101	苯乙烯、二乙烯苯等共聚物	天津试剂二厂	0.28	330		白	非极性	270	气体和低沸点化合物的分析，还适于分析烷烃、芳烃、含氧有机化合物、卤代烷、胺、腈等
GDX-102	苯乙烯、二乙烯苯等共聚物	天津试剂二厂	0.20	680		白	非极性	270	分析高沸点化合物
GDX-103	苯乙烯、二乙烯苯等共聚物	天津试剂二厂	0.18	670	—	白	非极性	270	分析高沸点化合物，还可分离正丙醇、叔丁醇
GDX-104	苯乙烯、二乙烯苯等共聚物	天津试剂二厂	0.22	590	—	半透明	非极性	270	气体分析
GDX-105	苯乙烯、二乙烯苯等共聚物	天津试剂二厂	0.44	610	—	白	非极性	270	惰性气体分析、烯烃气体中微量水的分析
GDX 201	苯乙烯、二乙烯苯等共聚物	天津试剂二厂	0.21	510	—	白	非极性	270	性能与GDX-102相同，但效能差
GDX 202	苯乙烯、二乙烯苯等共聚物	天津试剂二厂	0.18	480	—	白	非极性	270	分离高沸点化合物所需时间短，还可分离正丙醇、特丁醇
GDX 203	苯乙烯、二乙烯苯等共聚物	天津试剂二厂	0.09	800	—	白	非极性	270	分离高沸点化合物时，所需时间最短，还可分离乙酸、苯、乙酐
GDX-301	三氯乙烯、二乙烯苯共聚物	天津试剂二厂	0.24	460	—	白	弱	250	分析乙炔，氯化氢
GDX-303	三氯乙烯、二乙烯苯共聚物	天津试剂二厂	—	—	—	白	—	250	
GDX-401	含氮杂环单体、二乙烯苯共聚物	天津试剂二厂	0.21	370	—	乳白	中等	370	乙炔、水、氯化氢分析，甲醛水溶液，氨水
GDX 403	含氮杂环单体、二乙烯苯共聚物	天津试剂二厂	0.17	280	—	乳白	中等	250	低级胺中的水分析，水中氨和甲醛的分析
GDX 501	含氮杂环单体、二乙烯苯共聚物	天津试剂二厂	0.33	80	—	淡黄	较强	270	C_4烯烃异构体的分析

续表

名　称	结构说明	供应者	堆密度/ $g \cdot cm^{-3}$	比表面积/ $m^2 \cdot g^{-1}$	孔径/ nm	颜色	极性①	最高使用温度/℃	应用范围
GDX-502	含氮杂环单体、二乙烯苯共聚物	天津试剂二厂	—	170	—	白	较强	250	$C_1 \sim C_2$ 烯，CO，CO_2 的分析
GDX-601	含强极性基团的聚二烯苯	中国科学院化学所	0.3	90		黄	强	200	分离环己烷和苯
GDX-701	聚四氟乙烯	中国科学院化学所	—	—	—	—	—	—	
401 有机担体	苯乙烯、二乙烯苯等共聚物	上海试剂一厂	0.32	300～400	—	白	非极性	270	类似于GDX-101
402 有机担体	苯乙烯、二乙烯苯等共聚物	上海试剂一厂	0.27	400～500	—	白	非极性	270	类似于GDX-102
403 有机担体	苯乙烯、二乙烯苯等共聚物	上海试剂一厂	0.21	300～500	—	白	非极性	270	类似于GDX-103
404 有机担体	二乙烯苯、含氮极性单体（丙烯腈）共聚物	上海试剂一厂	—	<80	—	白	较强	270	类似于GDX 105
405 有机担体	二乙烯苯、三氯乙烯共聚物	上海试剂一厂	—	<150	—	—	—	—	—
406 有机担体	苯乙烯、二乙烯苯共聚物	上海试剂一厂	—	—	—	—	—		类似于 Porapak P
407 有机担体	二乙烯苯、乙基乙烯共聚物	上海试剂一厂	—	—	—	—	—	—	与 Porapak Q 相似
408 有机担体	二乙烯苯、苯乙烯、极性单体共聚物	上海试剂一厂	—	—	—	—	—	—	与 Porapak R 相似
Chromosorb 101	苯乙烯、二乙烯苯共聚物	Johns-Manville	0.30	30～40	350	白	弱	275	分离酸、醇、二元醇、烷、酯、酮、醛、醚、碳氢化合物
Chromosorb 102	苯乙烯、二乙烯苯共聚物	Johns-Manville	0.29	300～400	8.5	白	中等	250	分析惰性气体、低沸点气体、醇及水
Chromosorb 103	交联聚苯乙烯	Johns-Manville	0.32	15～25	350	白	弱	275	胺类、酰胺、醇、醛、肼、酮
Chromosorb 104	丙烯腈、二乙烯苯共聚物	Johns-Manville	0.32	100～200	60～80	白（用时变褐色）	强	250	分析腈类、硝基烷、硫化氢水溶液、二酚、氮的氧化物、氨
Chromosorb 105	芳烃高聚物	Johns-Manville	0.34	600～700	10～60	白	中等	250	分析低级烃中甲醛、乙炔及沸点低于200℃的有机物
Chromosorb 106	交联聚苯乙烯	Johns-Manvill	0.28	700～800	5.0	白	弱	225	分离 $C_2 \sim C_8$ 脂肪醇、气体
Chromosorb 107	交联聚丙烯酸酯	Johns-Manville	0.30	400～500	8.0	白	中等	225	分离甲醛、含硫气体、中等极性化合物
Chromosorb 108	交联聚丙烯酸酯	Johns-Manville	0.30	100～200	25.0	白	中等	225	气体、水、醇、醛、酮、二元醇

续表

名　称	结构说明	供应者	堆密度/ $g \cdot cm^{-3}$	比表面积/ $m^2 \cdot g^{-1}$	孔径/ nm	颜色	极性[1]	最高使用温度/℃	应用范围
Chromosorb T	四氟乙烯氟碳	Johns Manville	0.42	7～8	500	白	弱	250	分析气体硫化物、水、卤化物、硫醇、肼
Porapak N	苯乙烯、二乙烯苯、乙烯基吡咯烷共聚物	Waters Associated Inc.	0.39	437	—	白	中等	190	分析甲醛水溶液中的组分
Porapak P	苯乙烯、乙基苯乙烯、二乙烯苯共聚物	Waters Associated Inc.	0.28	120	10^3	白	弱极性	250	分离乙烯、乙炔，还适于分析烷烃、芳烃、含氧有机化合物、卤代烷、腈、胺等
Porapak PS	硅烷化的 Porapak P	Waters Associated Inc.	—	—	—	白	弱极性	250	分离乙烯、乙炔，还适于分析烷烃、芳烃、含氧有机化合物、卤代烷、腈、胺等
Porapak Q	乙基苯乙烯、二乙烯苯共聚物	Waters Associated Inc.	0.25～0.35	600～840	7.5～40	黄	非极性	250	分离乙烯、乙炔，还适于分析烷烃、芳烃、含氧有机化合物、卤代烷、腈、胺等，能很好地分离正丙醇、叔丁醇
Porapak QS	硅烷化的 Porapak Q	Waters Associated Inc.	—	—	—	白	非极性	250	分离乙烯、乙炔，还适于分析烷烃、芳烃、含氧有机化合物、卤代烷、腈、胺等，能很好地分离正丙醇、叔丁醇
Porapak R	苯乙烯、二乙烯苯、乙烯基吡咯烷共聚物	Waters Associated Inc.	0.35	450～750	7.6	白	中等	250	分析活泼化合物如氯及氯化氢中的水
Porapak S	苯乙烯、二乙烯苯、乙烯基吡咯烷共聚物	Waters Associated Inc.	0.35	300～590	7.0	白	中等	250	分析极性气体，醇类
Porapak T	—	Waters Associated Inc.	0.44	200～450	9.1	白	很强	190	分析极性气体，醇类
Super Q	—	Alltech	—	—	—	—	低	250	Porapak Q 的改性产品适于有机溶剂和酸
Gaschrom 220	—	Alltech	—	450	10	—	低	250～300	类似 Porapak Q 和 Chromosorb 102
Gaschrom 254	—	Alltech	—	100	30		很弱	275～300	代替 Porapak Q 和 Chromosorb 101
Tenax-TA	聚 2,6-二苯基对苯醚	Chrompack	0.37	20～30	—	—	—	375	分析醇、乙二醇、酚、胺、醛、酮、芳烃
Cekachrom 1	乙基苯乙烯、二乙烯苯共聚物	Chemiekombinat Bitterfeld	—	400～500	—	—	—	250	分析水中有机物
Cekachrom 2	乙基苯乙烯、二乙烯苯共聚物	Chemiekombinat Bitterfeld	—	250～350	—	—	—	250	分析水中有机物

续表

名　称	结构说明	供应者	堆密度/$g\cdot cm^{-3}$	比表面积/$m^2\cdot g^{-1}$	孔径/nm	颜色	极性[①]	最高使用温度/℃	应用范围
Cekachrom 3	苯乙烯、乙基苯乙烯、二乙烯苯共聚物	Chemiekombinat Bitterfeld	—	100～150	—	—		250	分析醇、胺、水中低分子量酸
Cekachrom 4	乙基苯乙烯、二乙烯苯、甲基丙烯酸酯共聚物	Chemiekombinat Bitterfeld	-	150～250	—		—	200	分析气体、极性混合物(水、醇、醛、酮、酯)
Cekachrom 5	乙基苯乙烯、二乙烯苯、甲基丙烯酸酯共聚物	Chemiekombinat Bitterfeld	—	20～50		—	—	200	
Cekachrom 6	乙基苯乙烯、二乙烯苯、丙烯腈共聚物	Chemiekombinat Bitterfeld	—	250～350	—	—	—	200	分析腈类、H_2S水溶液、芳烃中微量水
Spheron SE	苯乙烯、甲基丙烯酸乙烯酯聚合物	Laboratorni pristroje	—	70	—	—	—	280	分析烃类、醇、乙二醇、酸
Separon SE	苯乙烯、二甲基丙烯酸酯共聚物	Laboratorni pristroje	—	70	—	—	—	230	分析醇、酯
Separson AE	苯乙烯、二甲基丙烯酸酯共聚物	Laboratorni pristroje	—	50		—	—	230	
Hayesep A	高纯二乙烯苯	Hayes Separation Inc.	0.356	526	—	—	7	165	室温下分永久性气体，在较高温度下适于分离C_2烃、H_2S和H_2O
Hayesep B	二乙烯苯、聚乙二胺	Hayes Separation Inc.	0.330	608	—	—	8	190	适于分离C_1和C_2胺以及水中氨
Hayesep C	二乙烯苯丙烯腈	Hayes Separation Inc.	0.332	442	—	—	6	250	适于极性物质，如：HCN、NH_3、H_2S和H_2O类似于Chromosdb 104
Hayesep D	高纯二乙烯苯共聚	Hayes Separation Inc.	0.331	795	790～800	—	1	290	适于空气中CO和CO_2分析。特适于H_2O和H_2S的分离分析乙炔在其他C_2前出峰
Hayesep N	二乙烯苯乙二醇二甲腈酯	Hayes Separation Inc.	0.355	405	—	—	9	165	类似于Porapak N
Hayesep P	二乙烯苯苯乙烯	Hayes Separation Inc.	0.420	165	—	—	3	250	类似于Porapak P
Hayesep Q	二乙烯苯	Hayes Separation Inc.	0.351	582	—	—	2	275	类似于Porapak Q

续表

名称	结构说明	供应者	堆密度/g·cm⁻³	比表面积/m²·g⁻¹	孔径/nm	颜色	极性[1]	最高使用温度/℃	应用范围
Hayesep R	二乙烯苯 N-2烯基 2 吡咯	Hayes Separation Inc.	0.324	344			5	250	类似于 Porapak R
Hayesep S	二乙烯苯 4-乙烯基吡啶	Hayes Separation Inc.	0.334	583	—	—	4	250	类似于 Porapak S
Hayesep T	乙二醇二甲腈酯	Hayes Separation Inc.	0.381	250	—	—	10	165	类似于 Porapak T

[1] Hayesep 系列固定相极性大小次序为：1——最弱，10——最强。

表 5-9 低沸点烃等气体在 GDX 系列吸附剂上的相对保留值

GDX 系列	101	102	105	203	302	303	401	501	502
柱温/℃	64	64	62	64	64	64	64	64	62
化合物	$r_{i,s}$								
一氧化碳	0	0.005	0.0044	0	0.016	0	0.0156	0.024	0.004
甲烷	0.114	0.106	0.117	0.099	0.106	0.107	0.0937	0.102	0.097
二氧化碳	0.367	0.353	0.351	0.303	0.339	0.336	0.343	1.11	0.484
乙烯	0.722	0.713	0.752	0.668	0.699	0.713	0.742	1.00	0.775
乙炔	0.777	0.730	0.776	0.668	0.715	0.746	0.886	2.46	1.140
乙烷	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
丙烯	4.02	4.27	4.15	4.59	4.34	4.18	4.28	5.15	4.47
丙烷	4.36	4.78	5.04	5.29	4.81	4.68	5.02	3.86	4.48
氧硫化碳	—	3.29	—	2.92	3.05	3.01	—	—	3.65
硫化氢	—	2.05	—	1.59	1.86	1.87	—	—	2.85
二氧化硫	—	6.08	—	4.97	5.70	5.75	—	—	11.8
甲硫醇	—	15.1	—	—	14.0	—	—	—	12.1

表 5-10 水、氨及低沸点烃在 GDX 系列吸附剂上的相对保留值

GDX 系列	101	102	105	203	302	303	401	501	502
柱温/℃	106	107	107	105	108	107	106	106	105
化合物	$r_{i,s}$								
一氧化碳	0.0077	0	0	0.016	0.0156	0	0.0329	0	0.013
甲烷	0.146	0.157	0.148	0.08	0.132	0	0.142	0.16	0.146
二氧化碳	0.415	0.394	0.410	0.37	0.421	0.389	0.450	1.09	0.443
乙烯	0.784	0.719	0.774	0.74	0.773	0.722	0.802	1.00	0.716
乙炔	0.761	0.710	0.774	0.71	0.773	0.767	0.868	2.23	1.20
乙烷	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
丙烯	3.04	3.11	3.12	3.29	3.20	3.14	3.25	3.73	3.15
丙烷	3.25	3.25	3.34	3.63	3.44	3.28	3.47	2.87	3.13
丁烷	10.03	11.8	10.7	12.0	11.07	10.6	10.7	7.52	9.55
水	2.34	1.88	1.71	2.02	1.87	3.44	5.10	35.8	6.32
氨	2.44	1.53	1.14	1.32	1.90	3.10	1.67	5.47	2.66

表 5-11　低碳醇、醛、酸、醚在 GDX 系列吸附剂上的保留指数

GDX 系列	101	102	105	203	302	303	401	501	502
柱温/℃	106	107	107	106	109	107	106	106	106
化合物	*I*								
水	272.0	247.6	244.3	254.3	266.8	304.2	331.6	556.0	362.3
甲醇	345.6	322.0	318.9	303.9	322.3	342.8	371.6	564.4	409.1
甲醛	351.[illegible]	328.9	320.0	312.4	328.9	—	269.1	449.7	320.6
甲酸	505.3	387.9	415.8	304.3	453.5	476.9	—	560.5	405.9
乙醇	429.7	406.7	389.0	393.9	406.2	425.5	440.5	637.9	481.3
乙醚	502.5	493.5	493.3	492.0	497.3	495.8	492.6	555.5	515.4

表 5-12　多种化合物在 GDX 系列吸附剂上的保留指数

GDX 系列	102	203	302	401	501	303
柱温/℃	201	203	196	196.5	196.5	196
化合物	*I*					
丙醇	512.9	524.5	518.4	572.8	833.4	509.7
异丙醇	466.4	475.1	487.6	518.2	742.8	438.4
正丁醇	619.4	631.7	629.5	681.4	941.3	620.9
仲丁醇	578.6	590.2	587.0	632.1	840.6	576.0
异丁醇	596.1	609.1	604.9	656.8	895.9	594.9
叔丁醇	527.1	544.3	531.8	568.3	739.1	523.4
戊醇	727.7	736.4	733.6	793.0	1024.2	127.6
己醇	830.0	841.7	837.6	893.4	1140.1	827.6
庚醇	875.7	885.6	880.6	923.0	1101.7	869.2
环己醇	839.9	854.2	853.4	907.5	1232.9	843.3
甲乙酮	563.0	573.5	580.8	607.3	869.2	567.2
庚酮	846.9	854.9	859.1	889.5	1096.0	852.5
辛酮	971.0	976	979.1	—	1223.9	971.0
壬酮	—	1081.6	a	—	1336.5	—
环戊酮	740.2	743.6	757.0	794.5	1169.1	749.4
环己酮	851.8	858.0	868.0	905.0	1297	859.0
环庚酮	973.6	—	983.9	—	1431.1	974.8
乙酸乙酯	572.1	579	582.1	602.7	790.6	579.7
乙酸丁酯	775.7	780	787.5	808.7	988.1	781.3
乙酸戊酯	856.8	862.1	867.4	884.5	1050.6	860.4
乙酸	490.2	527.1	519.5	703.1	1046.9	506.9
丙酸	595.3	625.7	627.1	798.2	1118.9	618.1
丁酸	700.3	727.8	726.6	891.0	1202.3	720
戊酸	801.4	836.0	833.7	998.6	1320.4	830.6
苯	642.1	643.4	650.2	675.1	900	648.5
甲苯	743.3	742.2	748.4	779.1	989.7	750.6
乙苯	837.6	838.6	841.5	870.5	1070.5	840.1
邻、间二甲苯	812.8	843.2	847.0	875.7	1081.5	845.9
对二甲苯	864	864.4	868.6	923.4	1136	869.7
丙醚	670.6	675.3	677.4	694.8	876.4	674.6
丁醚	881.6	883.5	881.7	884.7	928.8	877.6
三氯甲烷	581.1	592.5	590.7	631.8	845.8	592.0
四氯化碳	640.8	645.2	643.7	666.6	783.5	645.9
丙醛	595.4	634.5	627.9	798.4	1118.1	608.5

续表

GDX 系列	102	203	302	401	501	303
柱温/℃	201	203	196	196.5	196.5	196
化合物	I					
辛醛	976.1	986.9	987.5	—	1256.3	974.1
环己烷	648.2	647.3	649.5	661	736.3	648.3
二乙胺	699	711.0	718	709.9	759.0	707.8
硝基甲烷	501.2	519.5	521.8	579	1011	511.1
乙腈	441.2	452.0	457.5	503.3	930.8	446
丙烯腈	184.7	495.6	500.3	548.2	897.2	489.7
吡啶	708.5	718.1	729.1	762.7	1107.2	719.8
α-甲基吡啶	781.3	790.1	798.6	828.3	1112	786.2

表 5-13　一些气体在 Chromosorb 系列吸附剂上的相对保留值(柱温:80℃)[14]

Chromosorb 系列 / $r_{i,s}$ / 化合物	101	102	103	104	105	106	107	108
空气	0	0	0	0	0	0	0	0
CH_4	0.11	0.15	0.11	0.16	0.11	0.13	0.13	0.13
CO_2	0.36	0.40	0.46	1.16	0.44	0.34	0.69	0.77
C_2H_6	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
C_2H_4	0.74	0.75	0.79	1.00	0.76	0.72	0.84	0.87
C_2H_2	0.73	0.72	0.93	2.32	0.93	0.64	1.49	1.87
C_3H_8	4.03	3.72	3.64	3.44	4.14	4.30	4.16	3.92
C_3H_6	3.58	3.37	3.64	4.20	3.79	3.65	4.15	3.75
i-C_4H_{10}	11.8	10.0	7.71	6.64	12.5	13.6	12.7	10.9
n-C_4H_{10}	15.2	13.2	12.8	10.8	16.1	17.7	16.1	13.7
N_2O	0.53	0.56	0.64	1.20	0.55	0.46	0.69	0.83
SF_6	0.54	0.52	0.57	0.24	0.61	0.67	0.79	0.57
H_2S	1.74	1.77	0.50	5.12	1.86	1.36	2.39	2.91
COS	2.70	2.68	3.32	4.32	2.78	2.45	3.09	3.28
SO_2	—	—	0.46	28.4	6.01	3.39	13.6	14.4
H_2O	4.46	2.95	16.6	46.6	9.58	1.69	15.5	20.6

表 5-14　H_2、空气、CO 在 Chromosorb 系列吸附剂上的保留时间①[14]

Chromosorb 系列 / t_R / 化合物	101	102	103	104	105	106	107	108
H_2	0.42	0.42	0.35	0.34	0.34	0.47	0.40	0.40
空气	0.49	0.48	0.35	0.34	0.41	0.65	0.49	0.46
CO	与空气峰重叠							

①色谱柱尺寸：1.83m×3.2mm；柱温：室温。

表 5-15　一些永久气体在 Chromosorb 系列吸附剂上的相对保留值①[14]

Chromosorb 系列 / $r_{i,s}$ / 化合物	102	105	106	Chromosorb 系列 / $r_{i,s}$ / 化合物	102	105	106
Ne	0	0	0	O_2	1.00	1.00	1.00
H_2	0.030	0.031	0.034	Ar	1.13	1.13	1.12
N_2	0.69	0.78	0.80				

①柱温：－78℃。

表 5-16 多种物质在 Porapak 与 Chromosorb 系列吸附剂上的保留指数(柱温 175 ℃)[15]

固定相 / I / 化合物	Porapak N	Porapak P	Porapak R	Porapak S	Porapak T	Chromosorb 102	Chromosorb 101	Chromosorb 103
乙醇	483	504	468	436	564	402	466	514
正丙醇	591	603	556	549	678	500	572	620
正丁醇	688	712	668	665	780	622	680	726
异丁醇	676	680	648	629	756	599	648	688
叔丁醇	604	574	558	586	667	534	561	595
乙酸	661	637	709	681	795	(515)	572	—
丙酸	756	739	796	781	903	(612)	681	
丙酮	531	552	479	481	606	470	524	547
甲乙酮	624	658	579	582	702	576	628	654
乙腈	528	582	480	462	639	452	563	—
丙烯腈	562	600	517	505	659	496	576	
乙二醇	768	807	758	702	940	629	704	—
丙二醇	826	843	801	765	980	687	756	—
硝基甲烷	596	665	542	524	721	514	610	—
硝基乙烷	677	737	621	612	792	599	698	—
1-硝基丙烷	—	815	—	—	872	690	—	—
2-硝基丙烷	—	772	—	—	829	661	—	—
苯	651	740	634	616	720	629	707	718
氯仿	614	686	601	585	689	581	651	665
二甲基甲酰胺	—	909		736	950	729	839	912
二噁烷	702	800	669	658	791	669	760	769
乙酸乙酯	623	645	583	561	688	578	630	650
甲基氧丙环(氧化丙烯)	490	538	454	453	552	456	516	541
吡啶	748	871	702	701	849	715	801	839

表 5-17 各种物质在 Chromosorb 系列吸附剂上的保留指数(柱温:190℃)[16]

Chromosorb 系列			101	102	103	104	105	106	107	108
化合物名称	沸点/℃	M_r	I							
乙酸甲酯	57.3	74.08	570	505	560	710	500	—	—	—
乙酸乙酯	77.1	88.10	655	580	630	785	585	—	—	—
乙酸丙酯	101.6	102.13	735	680	730	885	685	—	—	—
乙酸丁酯	126.1	116.16	540	780	825	990	790	—	—	—
乙酸	118.1	60.50	610	435		985	555	455	710	—
丙酸	141.1	74.10	715	495	—	1070	655	555	800	—
丁酸	164.0	88.10	805	610	—	1155	765	655	935	—
戊酸	186.4	102.13	910	705	—	1255	875	760	long	—
甲醇	64.7	32.00	440	360	420	625	365	315	430	535
乙醇	78.4	46.10	495	425	495	690	435	390	515	605
丙醇	97.2	60.10	595	510	595	795	535	485	620	705
丁醇	118.0	74.12	700	615	705	905	655	585	740	815
戊醇	119.9	88.15	805	725	810	980	760	690	890	925
异丙醇	82.4	60.10	555	485	540	720	490	455	570	645
异丁醇	108.1	74.12	665	595	660	865	625	570	705	735
异戊醇	130.0	88.15	775	700	780	985	755	675	835	905

续表

Chromosorb系列			101	102	103	104	105	106	107	108
化合物名称	沸点/℃	M_r	I							
仲丁醇	99.5	74.12	635	570	655	820	615	555	680	760
叔丁醇	82.6	74.12	565	525	575	765	545	515	625	—
叔戊醇	102.4	88.15	690	635	695	780	665	620	730	—
乙醛	20.20	44.05	440	400	410	615	395	365	430	530
丙醛	49.50	58.08	550	475	535	725	480	455	535	620
丁醛	75.70	72.11	645	565	630	830	580	550	615	715
苯	80.1	78.10	745	650	720	835	635	—		—
甲苯	110.6	92.14	845	750	820	935	—	—	—	—
乙苯	136.2	106.17	935	845	910	1020	—	—	—	—
二氯甲烷	40.2	84.93	590	510	575	715	—	—	—	—
三氯甲烷	61.2	119.40	675	590	660	—	—	—	—	—
四氯化碳	76.8	153.82	720	650	710	730	635	—	—	—
1,2-二氯乙烷	83.5	98.96	725	620	705	—	—	—	—	—
1,2-二氯丙烷	96.4	113.00	775	685	755	—	—	—	—	
二丙醚	90.1	102.18	645	510	690	—	—	—	—	—
二丁醚	142.4	130.23	885	880	885	—	—	—	—	—
1,2-乙二醇	196.0	62.10	780	625	—	—	—	—	—	—
1,3-丙二醇	97/6毫米	76.10	910	745	—	—	—	—	—	—
1,4-丁二醇	228.0	90.12	1030	895	—	—	—	—	—	—
1,3-丁二醇	116/20毫米	90.12	950	810	—	—	—	—	—	—
2,3-丁二醇	—	90.12	865	740	—	—	—	—	—	—
丁烯	—	—	1050	865	—	—	—	—	—	—
丁炔	—	—	1090	885	—	—	—	—	—	—
丙酮	56.5	50.10	555	480	530	755	465	375	560	620
甲乙酮	79.6	72.10	645	570	640	850	580	450	660	715
二乙酮	102.0	86.10	745	665	735	935	675	545	755	815
乙腈	81.6	41.05	580	460	565	855	480	420	565	685
丙腈	97.2	55.08	660	550	640	925	560	505	655	765
环己烷	80.7	84.16	700	650	695	710	640	—	—	—
环己烯	83.3	82.15	730	655	715	735	—	—	—	
二噁烷	—	—	775	675	770	935	—	—	—	—
硝基甲烷	65	61.04	650	510	—	935	530	—		—
苯酚	182	94.11	1070	905	—	—	—	—	—	—
吡啶	115.5	79.10	850	705	820	1025	720	—	—	—
甲胺	6.7/755毫米	31.06	—	—	390	—	—	—	—	—
乙胺	16.6	45.08	—	—	470	—	—	—	—	—
丙胺	49.0	59.11	—	—	575	—	—	—	—	—
丁胺	77.8	73.14	—	—	670	—	—	—	—	—
戊胺	103.0	87.17	—	—	770	—	—	—	—	—
己胺	129.0	101.19	—	—	865	—	—	—	—	—
异丙胺	32.0	59.11	—	—	525	—	—	—	—	—
异丁胺	66.0	73.14	—	—	645	—	—	—	—	—
异戊胺	95.00	87.17	—	—	745	—	—	—	—	—
叔丁胺	45.00	73.14	—	—	560	—	—	—	—	—
叔戊胺	76.00	87.17	—	—	680	—	—	—	—	—

续表

Chromosorb 系列			101	102	103	104	105	106	107	108
化合物名称	沸点/℃	M_r	I							
二甲胺	6.9	45.09	—	—	410	—	—	—	—	—
二乙胺	56	73.14	—	—	590		—	—	—	
三乙胺	89	101.19	—	—	710	—	—	—	—	—
二丙胺	109	101.19		—	770	—	—	—	—	—
二异丙胺	83	101.19	—	—	680	—	—	—	—	—
1,2-乙二胺	117.2	60.10	—		740	—	—	—	—	—
1,3 丙二胺	138.0	74.13	—	—	840	—	—	—	—	
1,4-丁二胺	54/11 毫米汞柱	88.15	—	—	940	—	—	—	—	—
1,5-戊二胺	—	102.18	—	—	1040	—	—	—	—	—
1,2-丙二胺	—	74.3	—	—	785	—	—	—	—	—
苯胺	184.4	93.13	—	—	1140	—	—	—	—	—
N-甲基苯胺	81/14 毫米汞柱	107.16	—	—	1210	—	—	—	—	—
N-乙基苯胺	97/21 毫米汞柱	121.18	—	—	1245	—	—	—	—	—
N-丙基苯胺	86/5 毫米汞柱	135.2	—	—	1335	—	—	—	—	—
N,*N*-二甲基苯胺	194.2	121.18	—	—	1220	—	—	—	—	—

表 5-18　一些气体在 Porapak 系列吸附剂上的相对保留值（柱温：80℃）[14]

Porapak 系列 / $r_{i,s}$ / 化合物	N	P	Q	QS	R	S	T
空气	0	0	0	0	0	0	0
CH_4	0.15	0.14	0.12	0.13	0.11	0.11	0.13
CO_2	0.60	0.45	0.35	0.37	0.41	0.45	0.69
C_2H_6	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
C_2H_4	0.83	0.79	0.74	0.73	0.77	0.75	0.85
C_2H_2	1.40	0.86	0.67	0.72	0.94	0.96	1.71
C_3H_8	4.28	3.34	4.00	4.14	4.13	4.08	4.45
C_3H_6	4.23	3.17	3.52	3.65	3.75	3.80	4.53
i-C_4H_{10}	13.8	7.90	11.8	12.7	12.6	12.0	14.8
n-C_4H_{10}	17.8	10.8	15.3	16.9	16.4	15.8	19.2
N_2O	0.68	0.66	0.48	0.50	0.53	0.55	0.73
SF_6	0.74	0.38	0.63	0.66	0.64	0.59	0.81
H_2S	2.17	2.24	1.51	1.55	1.89	2.14	2.38
COS	2.90	2.97	2.55	2.58	2.73	2.86	3.02
SO_2	10.5	5.17	3.61	4.06	6.25	8.67	13.4
H_2O	9.33	3.83	1.36	2.63	6.11	8.87	11.2

表 5-19　一些永久气体在 Porapak 系列吸附剂上的相对保留值(柱温：－78℃)[14]

化合物 ＼ r_{is} ＼ Porapak 系列	N	P①	Q	QS	R	S	T
Ne	0	0	0	0	0	0	0
H_2	0.028	0	0.045	0.033	0.039	0.033	0.026
N_2	0.87	0.62	0.75	0.76	0.76	0.76	0.90
O_2	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
Ar	1.12	1.15	1.13	1.13	1.13	1.13	1.09

① 因流出时间短可能有偏差。

表 5 20　一些低沸点化合物在 Porapak 系列吸附剂上的保留时间

Parapak 系列	P	Q	R	S	T	F	Q	R	S	T	P	Q	R	S	T
柱温/℃	157	157	157	157	157	100	100	100	100	100	32	32	32	32	32
化合物	t_R														
空气	0.28	0.3	0.3	0.39	0.32	0.31	0.29	0.23	0.40	0.42	0.39	0.30	0.35	0.33	0.44
甲烷	—	0.35	0.39	0.46	0.40	0.39	0.59	0.33	0.52	0.45	0.49	0.47	0.61	0.8	0.66
二氧化碳	—	—	0.39	0.62	0.50	—	—	0.56	0.78	0.85	0.83	1.1	1.72	1.7	3.6
乙烯	—	0.5	0.52	0.70	0.53	0.54	0.88	0.75	1.1	0.95	1.27	2.3	3.2	4.0	3.8
乙炔	—	—	0.58	0.62	0.64	—	0.88	0.95	1.2	1.4	1.46	2.3	4.8	5.0	11.0
乙烷	—	0.55	0.58	0.70	0.53	0.54	0.88	0.95	1.3	1.0	1.76	3.3	4.35	5.6	4.5
水	0.48	0.65	1.0	1.4	1.7	1.00	1.2	3.5	3.2	7.1	4.88	5.9	50.0	33.2	110
丙烯	—	—	0.91	1.4	0.91	—	—	2.3	3.6	2.6	5.0	16	18.7	26	27
丙烷	—	1.16	0.91	1.4	0.91	1.00	2.9	2.6	3.6	2.6	7.9	21	22.8	29	24
氯甲烷	—	1.21	1.1	1.6	1.3	1.2	3.2	2.8	4.5	4.2	8.6	19	—	34	50
氯乙烯	—	1.7	1.6	2.2	1.6	1.6	5.6	4.7	7.1	6.8	—	—	—	—	—
甲醇	0.54	1.1	1.5	1.9	2.2	1.4	2.9	5.6	7.8	10.0	—	—	—	—	—
环氧乙烷	—	—	1.35	—	2.1	—	—	4.2	7.8	9.5	—	—	—	—	—
氯乙烷		2.5	2.3	3.1	2.7	2.7	9.7	8.5	13.5	13	—	—	—	—	
丙酮	1.00	3.5	3.4	4.5	5.8	5.3	17	15	36	41	—	—	—		—
乙醇	0.75	2.2	2.8	3.4	4.1	2.8	8.2	14	19.5	26	—	—	—	—	—
戊烷	1.11	5.6	4.5	5.8	3.6	6.7	—	20	36	22	—	—	—		—
环戊烷	1.3	7.1	5.5	7.5	4.5	10.0	—	25	49	28	—	—		—	—
丁二烯	0.73	—	2.0	2.7	1.9	2.4	7.9	7.5	11	9.1	—	—	—	—	
异丙醇	0.94	3.8	4.5	5.7	6.7	5.2	18	27	40	54	—	—	—	—	
乙腈	1.09	3.2	3.2	4.2	6.2	4.9	12	13	20	41	—	—	—		—
丙烯腈	1.22	4.1	4.4	5.7	7.7	7.0	21	21	32	58	—	—	—	—	—
乙醚	0.93	4.9	4.2	5.5	4.3	6.6	30	22	35	28	—	—	—		—
二氯甲烷	1.2	4.2	3.7	5.3	5.0	5.5	19	19	29	34	—	—	—	—	—
正丙醇	1.2	5.0	6.5	7.8	9.5	7.7	29	47	65	85	—	—	—	—	—
叔丁醇	1.25	6.1	7.2	8.2	10.5	7.7	39	55	74	98	—	—		—	—
己烷	2.1	13.5	8.5	13	8.1	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
环己烷	2.35	17	10.5	17	10.0	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
苯	2.65	14.5	10.0	16	13.0	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
硝基乙烷	2.55	9.7	8.5	13	22	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
乙二醇	3.1	10.5	23	28	53	—	—		—	—	—	—	—	—	
丙二醇	4.0	18.5	34	42	69	—		—	—	—	—	—	—		—
甲酸	—	2.05		26	13.5	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
乙酸	—	4.3	14.5	26	21	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
丙酸		10.5	32	—	46	—	—	—	—	—	—	—	—	—	

表 5-21 低沸点物质在 Porapak 系列吸附剂上的相对保留值(柱温：30℃)①[16]

Porapak 系列 $r_{i,s}$ 化合物	P	PS	Q	QS	R	S	N	T
氧	0.426	0.484	0.153	0.176	0.204	0.180	0.162	0.154
氮	0.426	0.484	0.153	0.176	0.204	0.180	0.162	0.154
氩	0.426	0.484	0.153	0.176	0.204	0.180	0.162	0.154
一氧化碳	0.426	0.484	0.153	0.176	0.231	0.180	0.162	0.154
氧化氮	0.500	0.500	0.187	0.213	0.238	0.192	0.189	0.180
甲烷	0.486	0.500	0.231	0.273	0.279	0.279	0.236	0.256
二氧化氮	0.647	0.532	0.374	0.432	0.361	0.192	0.189	0.190
二氧化碳	0.662	0.694	0.409	0.420	0.517	0.483	0.602	0.820
氧化亚氮	0.780	0.806	0.478	0.534	0.565	0.593	0.623	0.790
乙炔	0.986	1.02	0.720	0.705	1.00	0.884	1.33	1.92
乙烯	0.838	0.887	0.720	0.739	0.776	0.744	0.812	0.857
氨	1.22	1.36	0.950	0.636	1.62	1.30	1.26	1.76
乙烷	1.00 (0.535min)	1.00 (0.488min)	1.00 (1.60min)	1.00 (1.39min)	1.00 (1.16min)	1.00 (1.36min)	1.00 (1.50min)	1.00 (1.54min)
水	2.44	2.85	1.33	1.17	6.75	5.44	9.14	15.6
硫化羰	2.13	2.21	2.08	2.31	2.44	2.55	2.70	3.06
二氟乙烷	2.15	2.47	2.44	2.77	3.42	3.40	5.99	7.75
氯二氟甲烷	2.27	2.50	2.70	2.40	4.83	4.12	7.31	9.00
二氧化硫	4.66	4.52	3.67	3.65	9.35	17.5	11.0	14.6
氯代甲烷	3.90	4.57	3.85	3.99	4.94	5.14	6.51	7.74
丙烯	2.59	2.06	4.02	3.84	3.82	3.96	4.76	4.72
丙烷	2.59	2.06	4.52	4.51	4.31	4.39	4.76	4.72
二氯二氟乙烷	2.65	3.10	4.64	5.03	4.93	5.24	6.52	6.67
氧化乙烯	8.24	9.67	7.94	8.46	10.8	10.9	16.5	22.1
氯二氟乙烷	3.78	5.12	9.65	8.08	10.1	10.1	—	—
二氯四氟乙烷	19.5	—	16.1	16.8	16.5	17.1	—	—

①色谱柱尺寸：1m×2.3mm；载气流速：25ml·min⁻¹。

表 5-22 一些化合物在 Porapak 系列吸附剂上的相对保留值(柱温：175℃)[16]

Porapak 系列 $r_{i,s}$ 化合物	PS	P	Q	QS	R	S	N	T
水	0.408	0.467	0.056	0.082	0.131	0.109	0.135	0.188
甲醇	0.475	0.542	0.127	0.134	0.180	0.168	1.193	0.244
甲醛	0.475	0.517	0.134	0.127	0.190	0.172	0.195	0.172
乙醛	0.475	0.542	0.169	0.170	0.190	0.187	0.222	0.259
乙醇	0.592	0.663	0.218	0.230	0.307	0.291	0.367	0.462
甲酸	0.717	0.717	0.225	0.189	0.368	0.386	0.819	0.187
乙腈	0.792	0.934	0.287	0.286	0.358	0.348	0.497	0.670
氧化丙烯	0.666	0.784	0.314	0.327	0.336	0.329	0.406	0.444
丙醛	0.750	0.808	0.338	0.343	0.376	0.383	0.476	0.543
丙酮	0.758	0.850	0.343	0.349	0.390	0.391	0.544	0.666
异丙醇	—	—	0.353	—	—	—	—	—
二氯甲烷	0.960	0.950	0.373	0.403	0.407	0.438	0.510	0.545
丙烯腈	0.892	1.00	0.388	0.404	0.474	0.475	0.660	0.853
乙酸	0.926	1.03	0.419	0.379	1.31	1.91	1.34	1.90
乙酸甲酯	0.800	0.883	0.419	0.434	0.445	0.438	0.598	0.735
丙醇	0.883	0.984	0.479	0.478	0.660	0.641	0.862	1.06
戊烷	0.666	0.684	0.501	0.536	0.481	0.469	0.490	0.467
异丁醛	0.934	1.05	0.598	0.623	0.670	0.676	0.905	1.04
丁醛	1.10	1.22	0.711	0.710	0.776	0.802	1.09	1.28
2-丁酮	1.18	1.26	0.734	0.730	0.820	0.846	1.20	1.41
氯仿	1.28	1.35	0.753	0.718	0.854	0.791	0.966	1.24
乙酸乙酯	1.13	1.22	0.812	0.852	0.864	0.862	1.20	1.44
异丁醇	1.26	1.36	0.902	0.900	1.24	1.21	1.76	2.07
丙酸	1.53	1.67	0.909	0.843	—	—	—	4.27

续表

Porapak 系列 r_{is} 化合物	PS	P	Q	QS	R	S	N	T
己烷	1.00 (0.994min)	1.00 (0.945min)	1.00 (4.93min)	1.00 (5.50min)	1.00 (4.67min)	1.00 (4.97min)	1.00 (5.94min)	1.00 (4.84min)
丁醇	1.48	1.58	1.07	1.07	1.47	1.46	2.08	2.50
苯	1.69	1.86	1.16	1.16	1.24	1.25	1.42	1.67
四氯化碳	1.53	1.53	1.16	1.14	1.07	1.07	1.17	1.34
乙酸异丙酯	1.47	1.46	1.33	1.43	3.48	1.44	2.04	2.38
乙酸丙酯	1.85	1.83	1.72	1.83	4.20	1.83	2.64	3.19
异戊醇	2.29	2.27	2.10	2.09	2.91	2.85	4.25	5.10
庚烷	1.64	1.58	2.28	2.28	2.18	2.05	2.18	2.20
戊醇	2.61	2.63	2.46	2.46	3.38	3.35	4.93	5.86
甲苯	2.92	3.18	2.71	2.69	2.43	2.85	3.24	3.65

应该指出，多孔聚合物的制备重复性差，聚合物单体未能完全被洗脱，使用过程发生收缩。这无疑会影响产品的色谱性能，(因此，表 5-8～表 5-22 所列的数据只有了解组分流出色谱柱顺序的意义)，并且需用丙酮洗涤和用脱氧的氮气加温老化 12h 后装柱使用。Hayesep 系列产品虽制备重复性好些，但仍要进行老化，另外建议用玻璃管柱。

以上固体固定相除用作填充柱的填料外，有些被用作制备 PLOT 型空心柱的填料。表5-23是部分国外市售 PLOT 柱资料。

表 5-23 部分国外商品 PLOT 柱[①]

品种类别	名 称	供 应 者	应用范围
分子筛	Molesieve 5A PLOT	Chrom pack	分析稀有气体；空气中 SF_6；氢的同位素；甲烷、乙烷同位素；室温下分析 Ne、O_2、N_2、CH_4、CO
	AT-Molesieve	Alltech	
	GS-Molesieve	J & W	
	Molesieve 5A	Hewlett-Packard	
	Rtx-Msieve 13x PLOT	Restek	
	PLOT-5A	Quadrex	
氧化铝	Al_2O_3/KCl PLOT	Chrompack	分析永久气体；C_3～C_5 烃异构体；乙烯、丙烯中杂质；卤代烃；C_1～C_{10}烃
	Al_2O_3/Na_2SO_4 PLOT	Chrompack	
	AT-Alumina	Alltech	
	GS-Alumina	J & W	
	Al_2O_3/KCl PLOT	Hewlett-Packard	
	Al_2O_3/Na_2SO_4 PLOT	Hewlett-Packard	
	Rtx-Alumina	Restek	
	GasPro Gsc	Astec	
多孔聚合物	Pora PLOT S	Chrom pack	分析酮、酯、卤代烃、烃类
	Pora PLOT u	Chrom pack	永久气体及 C_1～C_2 烃、C_2 烃中微量水；气体硫化物；腈化合物；硝基化合物；各种极性化合物
	Pora PLOT Q	Chrom pack	分析低沸点烃；极性挥发物；醇与水；甲烷；氟利昂-1,2；环氧乙烷
	AT-Q	Alltech	
	GS-Q	J & W	
	Pora PLOT Q	Hewlett-Packard	

① 硅胶 PLOT 柱是供作进一步涂渍固定液用，故不列入本表。

第二节 液体固定相

液体固定相是由固定液与载体制成。填充柱用的载体是固体颗粒，空心管柱则是其管柱的内壁，如何制备液体固定相及色谱柱将在第六章中叙述，此处只论及填充柱用的载体、固定液是些什么物质。

一、载 体

载体用于承载固定液使之尽可能与流动相多接触。填充柱用载体最基本的要求是：比表面积大和可负荷较多的固定液；粒度均匀、形状规则，不易粉碎；孔径分布均匀，孔结构利于组分传质；化学惰性和热稳定性好。迄今硅藻土类型的制品仍是气相色谱法最佳的载体，特殊情况时才用氟化物、玻璃微球作载体。

（一）硅藻土类载体

将硅藻土与一定量的木屑及粘合剂在900℃左右煅烧，粉碎成颗粒就得到红色的硅藻土载体；若是添加碳酸钠和改在1100℃左右煅烧，则得到白色的硅藻土载体。红色硅藻土载体在化学惰性方面不如白色，其他方面则较之更符合载体的基本要求。

上述方法制得的载体都有吸附性和催化性能，这是由于载体表面上无机杂质生成的酸性或碱性活性基团和表面上硅醇基团所致，故常将制得的载体作进一步处理，如用酸洗除去载体表面上铁等金属氧化物；用碱洗除去表面 Al_2O_3 等的酸性杂质；用硅烷试剂将硅醇基团进行硅烷化反应；用脱活剂饱和（键合）载体表面的吸附中心；用釉化方法堵塞载体表面的微孔，改变载体的表面性质，以利于色谱分离。白色硅藻土载体的惰性比红色载体好；未处理、酸处理、酸及硅烷化处理的载体其惰性依次较好。特殊制备和处理的高效载体则更好。

（二）氟化合物类载体

这类载体主要是聚四氟乙烯和聚三氟氯乙烯两个品种。使用于分析腐蚀性气体或强极性物质。

（三）玻璃微球载体

直接裸露的玻璃微球作载体者不多，因其可负荷的固定液量太少，为此将硅藻土、Fe_2O_3、ZrO_2 粉末涂敷在玻璃微球上，形成微孔结构，增大表面积。

国内外常用载体的情况列入表 5-24，可根据情况选用。

表 5-24 常用载体一览表

载体类别	名称	颜色	催化性吸附性	说明	供应者
硅藻土类	5701	红	有	硅藻土载体（其改进的产品为 6201）	大连化学物理所 大连催化剂厂
	6201	红	有	化学组成：$SiO_2$74.3%，$Al_2O_3$13.25%，Na_2O0.13%，K_2O0.25%，$TiO_2$0.47%，$Fe_2O_3$1.55%，MgO+CaO4.26，灼减 5.7%，比表面积 $5m^2 \cdot g^{-1}$，视密度 $0.47g \cdot cm^{-3}$	
	6201 硅烷化	红	小	6201 担体经六甲基二硅氨烷处理	
	6201 釉化	红	小	6201 担体经釉化处理	
	405	白	小	化学组成：$SiO_2$89.88%，$Al_2O_3$4.85%，Na_2O0.40%，K_2O0.02%，$TiO_2$0.40%，$Fe_2O_3$0.35%，MgO + CaO3.95%，灼减 0.15%，比表面积 $1.3m^2 \cdot g^{-1}$，视密度 $0.43g \cdot cm^{-3}$	

续表

载体类别	名　　称	颜色	催化性吸附性	说　　明	供应者
硅藻土类	上试 101	白	有	硅藻土经加 Na_2CO_3 助熔剂灼烧，与 Celite 545 相近	上海试剂一厂
	上试 101 酸洗	白	小	上试 101 担体经盐酸处理	
	上试 101 硅烷化	白	小	上试 101 担体经六甲基二硅氮烷处理	
	上试 102	白	有	硅藻土经加 NaCl 助熔剂灼烧，与 Chromosorb W 相近	
	上试 102 酸洗	白	小	上试 102 担体经盐酸处理	
	上试 102 硅烷化	白	小	上试 102 担体经六甲基二氯硅烷处理	
	上试 201	红	有	硅藻土载体，与 Chromosorb P 及 C-22 相近	
	上试 201 酸洗	红	有	上试 201 担体经盐酸处理	
	上试 201 硅烷化	红	小	上试 201 担体经六甲基二硅氮烷处理	
	上试 202	浅红	有	硅藻土载体	
	上试 202 酸洗	浅红	小	上试 202 担体经盐酸处理	
	上试 301 釉化	红	小	上试 201 担体经 B_2O_3 处理与灼烧	
	上试 302 釉化	浅红	小	上试 202 担体经 B_2O_3 处理与灼烧	
	上试 303 釉化	白	小	上试 101 担体经 B_2O_3 处理与灼烧	
	上试 304 釉化	白	小	上试 102 担体经 B_2O_3 处理与灼烧	
	白色担体 101	白	有	硅藻土载体	天津试剂二厂
	白色担体 101 酸洗	白	有	白色担体 101 经酸处理	
	白色担体 101 碱洗	白	有	白色担体 101 经碱处理	
	白色担体 101 硅烷化	白	小	白色担体 101 经硅烷化处理	
	红色担体 201	红	有	硅藻土载体	
	Gas Chrom A	白	有	硅藻土载体，比表面积 $4m^2 \cdot g^{-1}$，填充密度 $0.48g \cdot cm^{-3}$	Applied Science Laboratories, Inc
	Gas Chrom P	白	有	Gas Chrom A 担体经酸洗处理	
	Gas Chrom Z	白	小	Gas Chrom A 担体经酸洗与二甲基二氯硅烷处理	
	Gas Chrom Q	白	很小	Gas Chrom A 担体经酸洗与二甲基二氯硅烷处理的精制品，适用于甾族化合物的分析，比表面积 $2m^2 \cdot g^{-1}$涂渍量 20%	
	Ankrom®A	白	有	硅藻土载体经酸洗处理，涂渍量 25%	Analytical Engineering Laboratories, Inc
	Anakom AS	白	小	Anakrom®A 担体经二甲基二氯硅烷处理，涂渍量 25%	
	Anakom Q	白	很小	Anakrom 担体的精制品，比表面积 $1.4m^2 \cdot g^{-1}$，填充密度 $0.3g \cdot cm^{-3}$，适用于甾族化合物的分析	
	Anakrom P	红	有	硅藻土载体	
	Anakrom PA	红	有	Anakrom P 担体经酸处理	
	Anakrom S	红	很小	Anakrom P 担体经二甲基二氯硅烷处理	
	Anaprep P	红	有	硅藻土载体	Analabs, Inc
	Diatoport P	红	有	硅藻土载体	Hewlett-Packard
	Diatoport S	红	小	Diatoport P 担体经二甲基二氯硅烷处理	
	Supelcoport	白	小	硅藻土载体经二甲基二氯硅烷处理	Supelco
	Chromosorb A	红	有	硅藻土载体，比表面积 $2.7m^2 \cdot g^{-1}$，堆积密度 $0.4g \cdot cm^{-3}$，填充密度 $0.48g \cdot cm^{-3}$，多用于制备柱，涂渍量 25%	John-Manville
	Chromosorb G	白	有	硅藻土载体，比表面积 $0.5m^2 \cdot g^{-1}$，堆积密度 $0.47g \cdot cm^{-3}$，填充密度 $0.58g \cdot cm^{-3}$，涂渍量 5%	
	Chromosorb G AW	白	小	Chromosorb G 担体经酸洗处理	
	Chromosorb G AW-DMCS	白	很小	Chromosorb G 担体经二甲基二氯硅烷处理	
	Chromosorb G HP	白	很小	用高纯度硅藻土经硅烷化处理，适用于生化样品分析	
	Chromosorb P	浅红	有	由硅藻土保温砖制得，比表面积 $4.0m^2 \cdot g^{-1}$，堆积密度 $0.38g \cdot cm^{-3}$，填充密度 $0.47g \cdot cm^{-3}$，涂渍量 30%，适用于碳氢化合物及中等极性样品的分析	

续表

载体类别	名　称	颜色	催化性吸附性	说　明	供应者
硅藻土类	Chromosorb P AW	浅红	有	Chromosorb P 担体经酸处理	John-Manville
	Chromosorb P AW-DMCS	浅红	小	Chromosorb P 担体经二甲基二氯硅烷处理	
	Chromosorb R	红	有	硅藻土载体	
	Chromosorb R-6470-1	白	小	硅藻土载体，比表面积 $5m^2 \cdot g^{-1}$，粒度(1～4)μm，用于制备 SCOT 柱	
	Chromosorb W	白	有	硅藻土载体，比表面积 $1.0m^2 \cdot g^{-1}$，堆积密度 $0.18g \cdot cm^{-3}$，填充密度 $0.24g \cdot cm^{-3}$，涂渍量 15%，适用于分析极性样品，机械强度差	
	Chromosorb W AW	白	有	Chromosorb W 担体经酸洗处理	
	Chromosorb W AW-DMCS	白	小	Chromosorb W 担体经二甲基二氯硅烷处理	
	Chromosorb W AW-HMDS	白	有	Chromosorb W 担体经六甲基二硅氨烷处理	
	Chromosorb W HP	白	很小	Chromosorb W 担体经二甲基二氯硅烷处理	
	Chromosorb 750	白	很小	硅藻土经二甲基二氯硅烷处理，比表面积 $0.75m^2 \cdot g^{-1}$ 堆积密度 $0.33g \cdot cm^{-3}$，涂渍量 12%，适用于农药与生物医学样品分析	
	Sil-O-Cel C-22	红	有	硅藻土耐火砖担体，比表面积 $4.1m^2 \cdot g^{-1}$，涂渍量 25%	
	Sil-O-Cel C-22 DMCS	红	小	C-22 担体经二甲基二氯硅烷处理	
	Sil-O-Cel C-22 HMDS	红	小	C-22 担体经六甲基二氯硅烷处理	
	Sil-O-Cel C-22 SK	红	有	C-22 担体经酸处理	
	Celite 54	白	有	硅藻土载体，化学组成 SiO_2 89.6%，Al_2O_3 4.0%，Fe_2O_3 1.3%，TiO_2 0.2%，P_2O_5 0.2%，CaO 0.5%，MgO 0.6%，Na_2O+K_2O 3.3%，比表面积 $1m^2 \cdot g^{-1}$，堆积密度 $0.3g \cdot cm^{-3}$，涂渍量 30%	
	Shimalite W	白	有	硅藻土载体	日本
	Diasolid A	白	有	硅藻土载体经酸处理	
	Diasolid H(L,M)	—	有	硅藻土载体	
	Diasolid S	—	有	硅藻土载体经酸处理	
	Flusin GH	—	小	硅藻土载体经硅烷化处理	
	Flusin GU	—	有	硅藻土载体经酸处理	
氟化物类	Daiflon	白	有	聚三氟氯乙烯载体	日本
	Kel-F300	白	有	聚三氟氯乙烯载体	Applied Science Laboratories Inc
	Haloport-F	白	有	聚四氟氯乙烯载体，比表面积 $7.8m^2 \cdot g^{-1}$，填充密度 $0.5g \cdot cm^{-3}$	Hewlett-Packard
	701 聚四氟乙烯担体	白	小	聚四氟乙烯烧结塑料	上海试剂一厂
	Anaport Tee Six	白	小	聚四氟乙烯载体	Analubs, Inc
	Chromosorb T	白	小	聚四氟乙烯载体，比表面积 $7m^2 \cdot g^{-1}$，堆积密度 $0.43g \cdot cm^{-3}$，填充密度 $0.49g \cdot cm^{-3}$	John-Manville
	Fluoropak-80	白	很小	聚四氟乙烯载体，比表面积 $0.64m^2 \cdot g^{-1}$，填充密度 $0.7g \cdot cm^{-3}$	Fluorocarbon Co
	Fluoroport T	白	很小	由 Teflon 6 制成的聚四氟乙烯载体	Applied sci. Labs
	Flusin T	白	小	聚四氟乙烯载体，静电效应小，最高使用温度180℃	日本

续表

载体类别	名　称	颜色	催化性吸附性	说　明	供应者
氟化物类	Flusin T6	白	小	聚四氟乙烯载体，相当于 Teflon 6，最高使用温度240°C	日本
	Flusin TS	白	小	聚四氟乙烯载体，柱效高	日本
	Haloport F	白	小	聚四氟乙烯载体，比表面积 $7.8m^2 \cdot g^{-1}$，180°C开始分解	Hewlett-Packrd
	Teflon-6	白	小	聚四氟乙烯载体，比表面积 $11m^2 \cdot g^{-1}$，填充密度 $0.49g \cdot cm^{-3}$	Du Pont Chemical Co
	Polychrom-1	白	小	聚四氟乙烯载体，比表面积 $3\text{-}6m^2 \cdot g^{-1}$，填充密度 $0.7g \cdot cm^{-3}$	前苏联
玻璃微球类	玻璃微珠载体	无色	小	高硅玻璃制成的玻璃微珠经酸碱处理	上海试剂一厂
	硅烷化玻璃微珠载体	无色	很小	玻璃微球载体经二甲基二氯硅烷处理	上海试剂一厂
	玻璃球载体	无色	小		天津试剂二厂
	硅烷化玻璃球载体	无色	很小	玻璃珠载体经硅烷处理	天津试剂二厂
	Anaport TGB	无色	小	网纹表面玻璃珠	Analabs
	Anaport 玻璃珠	无色	小	玻璃珠载体经二甲基二氯硅烷处理	Analabs
	玻璃珠	无色	小	玻璃珠载体经二甲基二氯硅烷处理	Applied Sci Labs
	Cera 珠	无色	小	玻璃珠载体经二甲基二氯硅烷处理	Pittsburgh Corning
	GLC 100,110	无色	小	玻璃珠载体经二甲基二氯硅烷处理	Column Technology
	Corning Code 0201	无色	小	玻璃珠载体经二甲基二氯硅烷处理	Corning Glass Works
	Glaskugeln	无色	小	玻璃珠载体经二甲基二氯硅烷处理	Serva(法国)
	玻璃珠	无色	小		Perkin-Elmer
	Glassport M	无色	小		Hewlett-Packard
	玻璃珠	无色	小		Phase Sep.(英国)
	玻璃珠	无色	小		BDH(英国)
	Mikroglaskugeln	无色	小		Glaswerk Lauscha(德国)
	Zipax CSP	无色	小	薄壳玻璃珠，比表面积 $0.8m^2 \cdot g^{-1}$	Du Pont
	Liqua Chrom	无色	小	薄壳玻璃珠，比表面积 $(5\sim10)m^2 \cdot g^{-1}$	Applied Sci. Labs
	Perisorb B	无色	小	薄壳玻璃珠	Merck(德国)
	Jascosil WC 03	无色	小	薄壳玻璃珠	Jasco(日本)

二、固　定　液

(一) 固定液分类

在色谱柱操作温度下可使样品中组分彼此分离，且具备以下条件的物质，可作为气相色谱的固定液：

①能均匀地涂布在载体的表面；

②不与组分载气、载体发生不可逆化学反应；

③蒸气压力低、凝固点低、粘度适当；

④易于重复制备，成分稳定。

以往曾有千种以上物质被作为固定液使用；通过实践的筛选，经常使用的还有 200 多种，其中硅氧烷类和聚酯类化合物占多数，现在将以往曾有较大影响，现在使用较频的固定液，分类列入表 5-25 至表 5-46 中（包括减尾剂）。表中溶剂的缩写符号如下所示：

A　丙酮；	B　苯；	C　三氯甲烷；
D　二氯甲烷；	E　乙醇；	Ee　乙醚；
H　己烷；	M　甲醇；	P　石油醚；
T　甲苯；	W　水	

表 5-25 脂肪烃及其聚合物类固定液

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
1	正庚烷	*n* heptane		*n* C_7H_{16}	C,E,E_e	—	78	气体烃
2	正癸烷	*n*-decane		*n*-$C_{10}H_{22}$	C,T,E	—	30	气体烃
3	正十二烷+正1十二烯(1∶1混合)	*n* dodecane + *n*-dodecene-1(1∶1mixture)		*n*-$C_{12}H_{26}+CH_2=CH(CH_2)_9CH_3$	T			气体烃
4	正十三烷	*n*-tridecane		*n* $C_{13}H_{28}$	P		—	气体烃
5	正十六烷	*n*-hexadecane	Cetane	*n*-$C_{16}H_{34}$	B,T	20	50	C_5～C_9氯化合物、卤代烃、卤代硼烷
6	正十八烷	*n*-octadecane		*n*-$C_{18}H_{38}$	P,T,H	30	60	C_5～C_9氯化合物、卤代烃、卤代硼烷
7	正二十四烷	*n*-tetracosane		*n*-$C_{24}H_{50}$	H,P,T	52	140	C_4～C_{12}烃
8	异三十烷	squalane	角鲨烷	*i*-$C_{30}H_{62}$(即2,6,10,15,19,23-六甲基二十四烷)	T,C	20	120	液体烃、有机金属化合物、酮、醛、卤化合物、苯同位素
9	正三十六烷	*n*-hexatriacontane		*n*-$C_{36}H_{74}$	B,D,P,T,H	76	150	C_5～C_8环烷、其他液体烃
10	异三十碳六烯	squalene	角鲨烯	$[(CH_3)_2C=CHCH_2CH_2-C(CH_3)=CH-CH_2CH_2C(CH_3)=CH-CH_2-]_2$	A,C,T,H	0	100	液体烃
11	三乙烯基环己烷	trivinylcyclohexane		$C_6H_9(CH=CH_2)_3$				低沸点烃
12	三聚异丁烯	triisobutylene		$(CH_3)_3C-CH_2-C(CH_3)_2-CH_2-C(CH_3)=CH_2$ $(CH_3)_3C-CH_2-C(=CH_2)-CH_2-C(CH_3)_3$ $(CH_3)_3C-CH=C(CH_3)CH_2-C(CH_3)_3$ 的混合物	C,T,H		20	低沸点烃

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃ 最低	使用温度/℃ 最高	应用范围
13	四聚异丁烯	tetraisobutylene		$(CH_3)_3C\text{—}[CH_2\text{—}C(CH_3)_2]_3\text{—}CH_2\text{—}C(CH_3){=}CH_2$ 等	C、T	20	35	低沸点烃
14	聚乙烯	polyethylene	Alathon 7040	$(\text{—}CH_2CH_2\text{—})_n$ M_r:高压 1～5 万 低压 5～30 万	T	高压 112 低压 125～134	240	低沸点烃
			Marlex(美国 Phillips Chem. Co.)	—				
15	聚乙烯蜡	polyethylene wax	Tissuemat E	—		—	—	低沸点烃
16	乙烯丙烯共聚物	copolymer of ethylene and propylene		低分子量		—	350～400	低沸点芳烃
17	聚异丁烯	polyisobutylene	Oronite 32,128(美国 F & M Scientific Corp)	—	C	—	200	含氯农药
18	聚顺丁二烯	*cis*-polybutadiene	顺丁橡胶 CKJ(苏联)	—	—	—	—	烷基苯
19	1-十八碳烯	1-octadecene		$C_{18}H_{36}$	—	—	室温	低沸点烃
20	聚丁烯	polybutylene	Amoco H 100, H 300	—			·	低沸点烃

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/°C		应用范围
						最低	最高	
21	液体石蜡	liquid paraffin	mineral oil, medol	一种高分子量烷烃和环烷烃混合物	T	—	100	$C_1 \sim C_5$ 烷烃、硼氢化合物卤代烃、酯
			Nujol	一种处理过的液体石蜡，烷烃与环烷混合物	P, T	20	100	
22	变压器油	transformer oil		粗石蜡油混以少量苯胺和萘胺	—	—	—	低沸点烃
23	真空油脂(I)	vacuum grease(I)			Ec	—	150	液体烃
24	凡士林油	vaseline oil	VOL(低粘度) VOH(高粘度)	高级饱和烃分散在重油中的产品	C	20	40 75	低沸点烃
25	石蜡	paraffin wax	PW	固体的正构和支化烷烃混合物	C	60	140	$C_{10} \sim C_{18}$烷烃、芳烃、$C_2 \sim C_9$酮、酯
26	沥青	bitumen	asphalt	石油残渣物，由高级烃混合物组成，并含有少量含氧、氮和硫的化合物	B	—	150	C_{18}以上烷烃
27	乳化沥青		Elastex	—	—		—	芳烃
28	"阿皮松"润滑脂		Apiezon grease C, G, H, J, K, L, M, N, O, Q, S, T, W	高分子量饱和烃及有少量苯基、烯烃、羰基、羧基的混合物，最常用者为M, L型	C, D	50	300(L型-270～350; K, M型-250)	C_{10}以上烷烃、酚、醚、卤代烃、多氯联苯、螯合物、苯乙烯、煤焦油
29	八十七烷	Apolane-87		二(十八烷基)二乙基四十七烷	H, T	35	260	高沸点烷烃

表 5-26 芳烃及其聚合物类固定液

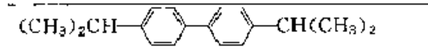
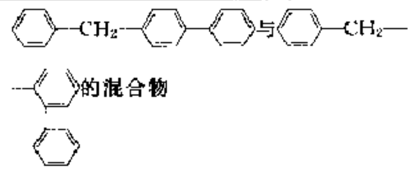
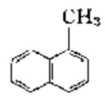
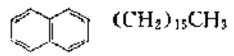
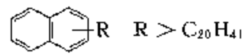
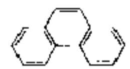
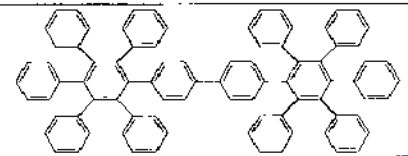
序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
1	芳烃	aromatic hydrocarbon	SP-525（美国 Supelco, Inc.）		T	60	270	低沸点芳烃
2	4,4′-二异丙基联苯	4,4′-diisopropyldiphenyl			B,Ee,E（热）	—	120	
3	二苯基甲烷	diphenylmethane		$(C_6H_5)_2CH_2$	C,E,Ee	—	40	
4	三苯基甲烷	triphenylmethane	Tritane	$(C_6H_5)_3CH$	B,C,Et,P	—	150	
5	苄基联苯	benzyl diphenyl	—		A,B,E,C	60	100	C_5~C_{10}烷烃、C_5~C_8环烷、卤化合物、醇、酯
6	α-甲基萘	α-methylnaphthalene			E,Ee	—	—	烷基苯
7	β-十六烷基萘	β-hexadecylnaphthalene	—			—	—	液体烃、低沸点芳烃
8	烷基萘	alkyl naphthalene	Fluhyzon（德国 Hydrierwerk Zeite）			50	280	低沸点芳烃、多环芳烃
9	菲	phenanthrene	—		B,C	—	120	低沸点芳烃、多环芳烃
10	三聚1,2-二苯乙烯	trimerized stilbene (M-3)	—	系用^{60}Co的γ线照射二苯乙烯之产物，为苯基取代的萜满$(C_6H_4CH_2CH_2CH_2)$衍生物	—	60	260	液体烃、醇、酯、卤代烃、含氯农药
11	2′,3′,5′,6′,2″,3″,5″,6″八苯基对五联苯	2′,3′,5′,6′,2″,3″,5″,6″-Octaphenyl-p-quinquinphenyl			四氢化萘（沸腾）	—	—	在熔点（470 ℃）以下使用，快速分析酯类、烃类化合物
12	聚苯焦油	polyphenyltar		含有大量苯基和亚苯基，M_r=800~2100		230	280	多核芳烃
13	聚苯乙烯	polystyrene	Lustrex HF 77	—	—	—	—	低沸点醇

表 5-27　聚硅氧烷类固定液

序号	中文名称	英文名称或商品名称	结构说明	供应者	溶剂	粘度/$mm^2 \cdot s^{-1}$ (20℃)	密度/$g \cdot cm^{-3}$	使用温度/℃		应用范围
								最低	最高	
1	聚二甲基硅氧烷	polydimethylsiloxane	—	—	—	—	—			
1 (1)	二甲基硅油	dimethyl silicone oil	$CH_3-\overset{CH_3}{\underset{CH_3}{Si}}-O-\left[\overset{CH_3}{\underset{CH_3}{Si}}-O\right]_n-\overset{CH_3}{\underset{CH_3}{Si}}-CH_3$ $n=80\sim400$	—	—	—	—	—	—	天然气、$C_5\sim C_{34}$烃、低沸点芳烃、多核芳烃、$C_4\sim C_8$环氧化合物、$C_2\sim C_8$醇、酚、酮、酯、醛、胺、吡啶、硝基芳烃、低沸点硫化合物、卤代烃、卤代醚、卤代硅烷、多氯联苯、硼氢化合物、烷基铅、烷基汞、氨基酸衍生物、镇痛药、组织胺、细菌挥发物、蔬菜、农药、溶剂、呋喃硫磷、苯基马来酰肼、胆固醇
		OV-101	100%甲基	美国 Ohio Valley	T,C	1200	0.975	0	350	
		ASI-100 Methyl	100%甲基	美国 Applied Sci. Labs	T,C	12500	0.976	0	300	
		SP 2100	100%甲基	美国 Supelco	T,C	600	0.976	0	350	
		DC-200/MS-200	100%甲基	美国 Dow Cornig	T,C	50～100000	0.97 (25℃)	0	250	
		DC-220,330	100%甲基	美国 Dow Cornig	T,C	0.5～1×10^5,44,50	—	0	250	
		SF-96	100%甲基	美国 Union Carbide	T,C	50～100000	—	0	250	
		SF-96-200	100%甲基	美国 Union Carbide	—	200	0.972 (25℃)	—	—	
		SF-96-2000	100%甲基	美国 Union Carbide	-	2000	0.974 (25℃)	—	—	
		L-45,46	100%甲基	美国 Union Carbide		50～100000	—		—	
		Viscasil	100%甲基	美国 General Electric	·	100000	0.978 (25℃)	—	—	
		Silicone Oil 81705	100%甲基	美国 General Electric	C,D,T	—	—	−50	200～300	

续表

序号	中文名称	英文名称或商品名称	结构说明	供应者	溶剂	粘度/$mm^2 \cdot s^{-1}$ (20℃)	密度/$g \cdot cm^{-3}$	使用温度/℃		应用范围
								最低	最高	
1(1)	二甲基硅油	Bayer M	100%甲基	德国 Bayer Farben-fabriken	—	50~300000	—	—	—	天然气、C_5~C_{11}烃、低沸点芳烃、多核芳烃、C_1~C_8环氧化合物、C_2~C_8醇、酚、酮、酯、醛、胺、吡啶、硝基芳烃、低沸点硫化合物、卤代烃、卤代醚、卤代硅烷、多氯联苯、硼氢化合物、烷基铅、烷基汞、氨基酸衍生物、镇痛药、组织胺、细菌挥发物、蔬菜、农药、溶剂、吩噻嗪磷、苯基马来酰肼、胆固醇
		F 111	100%甲基	英国 Imperial Chem. Inaustries	—	50~100000	—		—	
		Embaphase oil	100%甲基	英国 May & Baker	—	300~400	0.970~3(20℃)	—	—	
		DMF 1	100%甲基	印度 Metroark Private	—	1000 (25℃)	0.972 (25℃)		—	
		DMF-12	100%甲基	印度 Metroark Private	—	12500 (25℃)	0.973 (25℃)	-	-	
		DMF 30	100%甲基	印度 Metroark Private		30000 (25℃)	0.973 (25℃)	—	—	
		DMF-100	100%甲基	印度 Metroark Private	—	100000 (25℃)	0.973 (25℃)	—	—	
		Lukooil M-50	100%甲基	捷克 East Bohemian	—	50	—	—	-	
		Lukooil M-100	100%甲基	捷克 East Bohemian	—	100	—	—	—	
		Lukooil M-200	100%甲基	捷克 East Bohemian	—	200	0.973~0.977		—	
		Lukooil M-500	100%甲基	捷克 East Bohemian	—	500	—	-	—	
		Silicone Vaseline	100%甲基	捷克	—	—	—	-	-	
		硅油 I	100%甲基	上海试剂一厂、天津化学试剂二厂	C	—		—	230	
		PMS-100	100%甲基	前苏联 Reakhim	T,H	90~105	0.968	-30	250	
		PMS 200	100%甲基	前苏联 Reakhim	—	200	0.973	—	300	

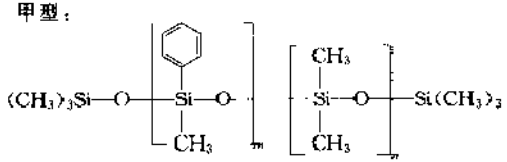
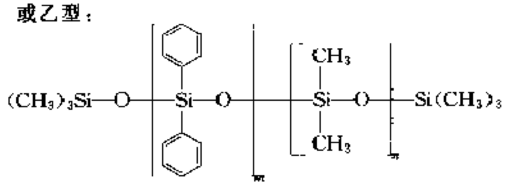
续表

序号	中文名称	英文名称或商品名称	结构说明	供应者	溶剂	粘度/$mm^2 \cdot s^{-1}$ (20 ℃)	密度/$g \cdot cm^{-3}$	使用温度/℃		应用范围
								最低	最高	
1-(1)	二甲基硅油	PMS 400	100%甲基	前苏联 Reakhim	-	400	0.980	—	300	天然气、C_5～C_{31}烃、低沸点芳烃、多核芳烃、C_4～C_8环氧化合物、C_2～C_8醇、酚、酮、酯、醛、胺、吡啶、硝基芳烃、低沸点硫化合物、氮代烃、卤代醚、卤代硅烷、多氯联苯、硼氢化合物、烷基铅、烷基汞、氨基酸衍生物、镇痛药、组织胺、细菌挥发物、蔬菜、农药、溶剂、吡嗪硫磷、苯基马来酰肼、胆固醇
		PMS-1000	100%甲基	前苏联 Reakhim	—	1000	0.976	—	300	
		PMS 5000	100%甲基	前苏联 Reakhim		5000	0.976	-	300	
		PMS-30000	100%甲基	前苏联 Reakhim	—	30000	0.976	—	—	
1 (2)	二甲基硅脂及橡胶	dimethyl silicone grease and silicone rubber	$CH_3-\underset{CH_3}{\overset{CH_3}{Si}}-O-\left[\underset{CH_3}{\overset{CH_3}{Si}}-O\right]_n-\underset{CH_3}{\overset{CH_3}{Si}}-CH_3$ $n>400$	—	—	—	--	—	—	C_5～C_{120}烃、模拟蒸馏、二甲萘、多环芳烃、酸、酚、硝基芳烃、卤代烃、氨基酸、维生素衍生物、糖衍生物、甾族化合物、香料、精油、乳酪、咖啡、冰片、含磷农药、溶剂
		OV-1	100%甲基	美国 Ohio Valley	C、T	橡胶	0.980	50	350	
		SE-30	100%甲基	美国 General Electric	C、T	9.47×10^6	0.996 (30℃)	50	300	
		OD-1	100%甲基	美国 Analabs	C、T	橡胶	--	—	—	
		JXR	100%甲基	美国 Applied Science Labs.	C、T	橡胶	—	—	—	
		E-301	100%甲基	美国 General Electric	T	9.47 ×10^6	0.996	50	350	
		E-300	100%甲基	英国 Imperial Chem. Industries	C+丁醇,(1+1)	橡胶	—	25	300～375	
		Silicone M-430	100%甲基	英国 Imperial Chem. Industries	T	橡胶	—	-	—	
		DC-123,400	100%甲基	美国 Dow Corning	—	10^{12}～10^{4}	—	—	—	
		DC-401,410,500	100%甲基	美国 Dow Corning	A	橡胶	—	50	300	
		Silastic-132,152,401	100%甲基	美国 Dow Corning	—	橡胶	—	—	—	

续表

序号	中文名称	英文名称或商品名称	结构说明	供应者	溶剂	粘度/$mm^2\cdot s^{-1}$ (20℃)	密度/$g\cdot cm^{-3}$	使用温度/℃ 最低	使用温度/℃ 最高	应用范围
1-(2)	二甲基硅脂及橡胶	MS-2211	100%甲基	英国 Midlands Silicone	—	$10^{12}\sim10^{14}$	—	—		$C_4\sim C_{120}$烃、模拟蒸馏、二甲苯、多环芳烃、酸、酚、硝基芳烃、卤代烃、氨基酸、维生素衍生物、糖衍生物、甾族化合物、香料、精油、乳酪、咖啡、冰片、含磷农药、溶剂
		W 95,950	100%甲基	美国 Union Carbide	—	橡胶	0.96	—	—	
		KS-1014	100%甲基	美国 Union Carbide		橡胶		·	—	
		Homacyan-410	100%甲基	德国 Bayer Farbenfabriken	—	橡胶	—	—		
		SKT	100%甲基	前苏联 Reakbim	T	橡胶	0.975	30	300	
		Lukopren M50	100%甲基	前捷克 East Bohemian	·	橡胶	—	—	—	
		Hi Vac Grease	100%甲基	美国 Dow Corning	—	糊状			—	
		DC 11	100%甲基	美国 Dow Corning	T,C	糊状	—	30	300	
		Perkin-Elmer Column O	100%甲基	美国 Perkin-Elmer	—	糊状	—	·	—	
		硅弹性体Ⅰ,Ⅱ	100%甲基	上海试剂一厂	·	橡胶	·	—	200	
2	聚甲基乙烯基硅氧烷	poly-methylvinylsiloxane	$CH_3-Si(CH_3)_2-O-[Si(CH_3)(CH{=}CH_2)-O]_m-[Si(CH_3)_2-O]_n-Si(CH_3)_2-CH_3$, $n\gg m$							$C_{12}\sim C_{36}$烷烃、$C_4\sim C_{24}$醇、$C_4\sim C_{10}$酮、叔胺、单糖衍生物
		SE-31,33	1%乙烯基	美国 General Electric	C,T	橡胶	—	50	300	
		DC430	1%乙烯基	美国 Dow Corning	—	橡胶	—	—	—	
		Silastic 430	1%乙烯基	美国 Dow Corning		橡胶	—		·	
		E 302,303	1%乙烯基	英国 Imperial Chem. Industries	—	橡胶	·			
		W-96,98,980	1%乙烯基	美国 Union Carbide	C,D	橡胶	—	50	300	

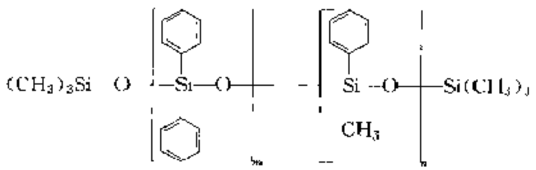
续表

序号	中文名称	英文名称或商品名称	结构说明	供应者	溶剂	粘度/ $mm^2 \cdot s^{-1}$ (20℃)	密度/ $g \cdot cm^{-3}$	使用温度/℃ 最低	使用温度/℃ 最高	应用范围
2	聚甲基乙烯基硅氧烷	W-982	0.15%乙烯基	美国 Union Carbide	-	橡胶	—	—	-	$C_{12} \sim C_{16}$ 烷烃、$C_4 \sim C_{24}$ 醇、$C_6 \sim C_{10}$ 酮、叔胺、单糖衍生物
		Rhodosil Comme 785	—	法国 Rhonepoulene	—	—		—	—	
		Lukopren G1000	—	前捷克 East Bohemion	—	-	—	—	—	
		Silicone Rubber Polymer	—	德国 Wacker Chemie	—	橡胶	—	—	—	
		SKTV	0.4%乙烯基	前苏联 Reakhim		—	0.975	--	--	
3	含苯基的聚甲基硅氧烷	polyphenylsilicone	甲型： 或乙型：							
3 (1)	含低苯基量的聚甲基硅氧烷	OV-3	10%苯基("3"的甲型结构)	美国 Ohio Valley	C,T	500 (25℃)	0.997	0	350	液体烃、烷基苯、多环芳烃、煤焦油、醇、酚、脂肪酸酯、苯二甲酸酯、酮、硝基芳烃、氯代硝基芳烃、烷基胺、芳胺、联苯胺、噻吩、卤代烃、氯酚、氯代醚、多氯联苯、亚硝酸胺、糖类衍生物、氨基酸衍生物、氢化物、镇痛药、抗组胺药、农药、香料、生物碱、防腐剂、蔬菜、溶剂
		OV-7	20%苯基("3"的甲型结构)	美国 Ohio Valley	C,T	500 (25℃)	1.021	0	350	
		DC-510	5%苯基(结构同"3")	美国 Dow Corning	—	50~1000	1.00 (25℃)	—	—	
		DC-556	10%苯基(结构同"3")	美国 Dow Corning		15~30	1.07	—	..	
		DC 555	25%苯基("3"的甲型结构)	美国 Dow Corning	C	—	—	—	275	
		DC-701	结构同"3"	美国 Dow Corning	—	10~15	1.03 (25℃)		—	

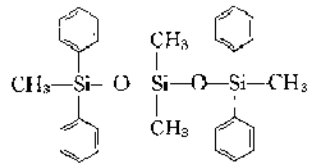
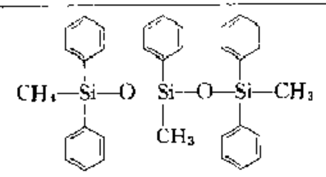
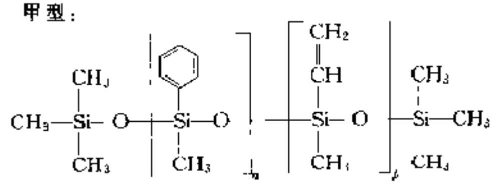
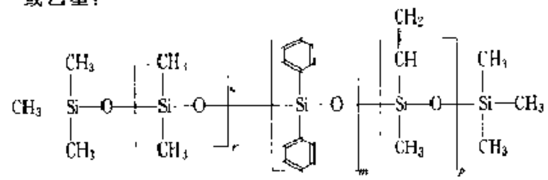
续表

序号	中文名称	英文名称或商品名称	结构说明	供应者	溶剂	粘度/$mm^2 \cdot s^{-1}$ (20 ℃)	密度/$g \cdot cm^{-3}$	使用温度/℃		应用范围
								最低	最高	
3-(1)	含低苯基量的聚甲基硅氧烷	SE-52	5%苯基("3"的乙型结构)	美国 General Electric	C,T	橡胶	—	50	300	液体烃、烷基苯、多环芳烃、煤焦油、醇、酚、脂肪酸酯、苯二甲酸酯、酮、硝基芳烃、氯代硝基芳烃、烷基胺、芳胺、联苯胺、噻吩、卤代烃、氯酚、氯代醚、多氯联苯、亚硝酸胺、槽类衍生物、氨基酸衍生物、氯化物、镇痛药、抗组胺药、农药、香料、生物碱、防腐剂、蔬菜、溶剂
		E-350	5%苯基(结构同"3")	英国 Imperial Chem. Industries	—	橡胶	—			
		MS-510	结构同"3"	英国 Midlanc Silicones			·	—	—	
		硅油 I	结构同"3"	上海试剂一厂，天津化学试剂一厂	Ee				200	
		OV 73	5.5%苯基("3"的乙型结构)	美国 Ohio Valley	T	橡胶	—	0	325	
		PSO60	5%苯基("3"的乙型结构)	美国 Petrarch Systems	—	100	0.98			
		PSO60.5	20%苯基("3"的乙型结构)	美国 Petrarch Systems	-	170～250	1.05	—	—	
		PSO62	5%苯基("3"的甲型结构)	美国 Petrarch Systems	—	30000	1.00			
		PSO63	25%苯基("3"的甲型结构)	美国 Petrarch Systems	-	125	1.07	—	—	
3-(2)	含中等苯基量的聚甲基硅氧烷	OV-61	33%苯基("3"的乙型结构)	美国 Ohio Valley	C,T	>50000 (25℃)	1.090	0	350	烷烃、低沸点芳烃、多环芳烃、C_7～C_{15}醇、甾族化合物、甘油三酸酯、喹啉、螯合物衍生物、香料、卤素化合物、农药、酯、镇痛药、精油
		OV 11	35%苯基("3"的甲型结构)	美国 Ohio Valley	C,T	500	1.057	0	350	
		OV-17	50%苯基("3"的甲型结构)	美国 Ohio Valley	C,T	1300～1500	1.092	0	375	
		SP-2250	50%苯基("3"的甲型结构)	美国 Supelco	C,T	—	—	0	375	
		DC-550	25%苯基("3"的甲型结构)	美国 Dow Corning	A	100～150	1.068 (25℃)	—	275	
		DC-702	25%苯基("3"的甲型结构)	美国 Dow Corning	C	45	—	0	225	
		DC-703	25%苯基("3"的甲型结构)	美国 Dow Corning	C	55		-	225	
		DC-710	50%苯基("3"的甲型结构)	美国 Dow Corning	A	475～525	1.10	0	250	
		OE-4130	33%苯基(结构同"3")	德国 Institute for Silicone & Fluorcarbon	-		0.99～1.04		—	

续表

序号	中文名称	英文名称或商品名称	结构说明	供应者	溶剂	粘度/$mm^2 \cdot s^{-1}$ (20 ℃)	密度/$g \cdot cm^{-3}$	使用温度/℃		应用范围
								最低	最高	
3 (2)	含中等苯基量的聚甲基硅氧烷	PN-200	结构同"3"	德国 Bayer Farbenfabriken	—		—			烷烃、低沸点芳烃、多环芳烃、C_7～$C_{1?}$醇、甾族化合物、甘油三酸酯、喹啉、螯合物衍生物、香料、卤素化合物、农药、酯、镇痛药、精油
		AR-20	25%苯基(结构同"3")	德国 Wacker Chemie	—	200	1.04 (25℃)	—		
		PHSi191 43	40%苯基(结构同"3")	美国 General Electric			-		—	
		Lukooil MF	25%苯基("3"的乙型结构)	捷克 East Bohemian	—	100～200	1.032～1.042	—		
		Lukooil DF	50%苯基("3"的乙型结构)	捷克 East Bohemian	—	500	1.08～1.10		—	
		MS 550、702、703、710	结构同"3"	—		—	-	—	—	
		硅油 V	结构同"3"	上海试剂一厂、天津化学试剂二厂	—			—	210	
		ASI-50	50%苯基("3"的甲型结构)	美国 Applied Sci. Labs	—		—		—	
		PS 160	50%苯基("3"的甲型结构)	美国 Petrach Systems		500	1.11	—	—	
		PFMS-4	50%苯基("3"的甲型结构)	前苏联 Reakhim	—	400～1000	1.104	—	350	
		PFMS-5	48%苯基(结构同"3")		—	90 (100℃)	1.079 (100℃)		350	
		PFMS-6	50%苯基("3"的甲型结构)		—	50	1.03		100	
		SKTF-100	50%苯基(结构同"3")		—	-	1.15		250	
3-(3)	高苯基含量的聚甲苯硅氧烷									螯合物衍生物
		OV-22	65%苯基	美国 Ohio Valley	A、C	>50000 (25℃)	1.127	0	350	
		OV-25	75%苯基	美国 Ohio Valley	A、C	>10000 (25℃)	1.150 (25℃)	0	350	
		PS-162	75%苯基	美国 Ohio Valley	—	100000	1.15		—	

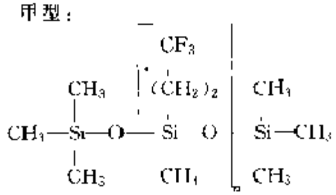
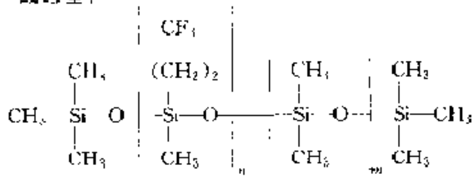
续表

序号	中文名称	英文名称或商品名称	结构说明	供应者	溶剂	粘度/$mm^2 \cdot s^{-1}$ (20 ℃)	密度/$g \cdot cm^{-3}$	使用温度/℃		应用范围
								最低	最高	
3-(4)(有确定结构的硅氧烷)	1,2,2,3四甲基-1,1,3,3-四苯基三硅氧烷	1,2,2,3-tetramethyl-1,1,3,3-tetraphenyl trisiloxane DC-704,MS-704,硅油Ⅲ		美国Dow Corning 德国Institute for Silicone & Fluorocarbon Chem Radebeul 上海试剂一厂,天津化学试剂二厂	—	39			280	
	1,2,3-三甲基1,1,2,3,3-五苯基三硅氧烷	1,2,3-trimethyl-1,1,2,3,3-pen taphenyl trisiloxane DC-705,MS-705,硅油IV		美国Dow Corning 德国Institute for Silicone & Fluorocarbon Chem Radebeul 上海试剂一厂,天津化学试剂二厂	A,C,D	175		15	200	
4	聚甲基苯基乙烯基硅氧烷	polymethyl phenyl vinyl siloxane	甲型:  或乙型: 							C_5~C_{43}烃、低沸点芳烃、多环芳烃、硝苯芳烃、硝基多环芳烃、卤代烃、有机酸酯、甘油三酸酯、醇类衍生物、多氯联苯、卤代烃、农药、氯代酚、氯代苯胺、胺类、吡啶、单糖衍生物、多胺衍生物、硅烷、镇痛药、甾族衍生物、精油、香料、酒、果汁、茶、抗氧化剂、溶剂
		OV-17 vinyl	1%乙烯基(甲型结构)	美国Ohio Valley		—		—		
		OV-73 vinyl	5.5%苯基,1.5%乙烯基(乙型结构)	美国Ohio Valley		—		—		
		SE 54	5%苯基,1%乙烯基(乙型结构)	美国General Electric	C,T	--	0.98	50	300	

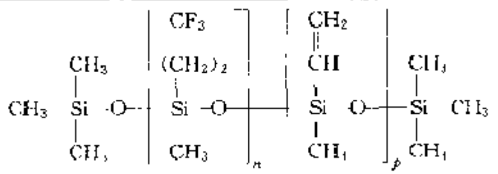
续表

序号	中文名称	英文名称或商品名称	结　构　说　明	供应者	溶剂	粘度/ $mm^2 \cdot s^{-1}$ (20℃)	密度/ $g \cdot cm^{-3}$	使用温度/℃		应　用　范　围
								最低	最高	
4	聚甲基苯基乙烯基硅氧烷	E-351	5%苯基,1%乙烯基	美国 Imperial Chem. Ind.	-	—	—	—	—	
		PS264	5.8%苯基,0.2%乙烯基(乙型结构)	美国 Petrarch Systems	—	橡胶	—		—	
		SKTFV-803	4%苯基,0.15%乙烯基	前苏联 Reakhim	—	橡胶	0.98		300	
5	聚甲基氯苯基硅氧烷	polymethyl trichlorophenyl siloxane	$CH_3-Si(CH_3)_2-O-[Si(CH_3)(C_6H_xCl_{(4-x)})-O]_m-[Si(CH_3)_2-O]_n-Si(CH_3)_3$ $x<4$							
		SP-400	11%氯苯基	美国 Supelco	T	—		0	270	
		DC-560(旧称 F60),F-61	11%对氯苯基	美国 Dow Corning	T	75	—	0	270	
		F-4050	3,5-二氯苯基	美国 Dow Corning	A,C,D	500	—	—	300	
		Versilube,F-50	10%三氯苯基	美国 General Electric	—	70	1.045		—	
		GE-F-50	—	美国 Appliec Sci. Lab.		—	—	—		
		Wacker CR	-	德国 Wacker Chemie	—	20～1000	—	—		
		Chlorsilicone CHS-1	—	前捷克 East Bohemian	—	—		—	—	
		Luko oil x-100	4.1%3,4,5-三氯苯基	前捷克 East Bohemian			—		—	
		Luko oil x-200	5.5%3,4,5-三氯苯基	前捷克 East Bohemian	—	—		—		
		Luko oil x-600	8.3%3,4,5-三氯苯基	前捷克 East Bohemian		·	—	—	—	
6	聚氟代烷基硅氧烷	Polyfluoroalkyl siloxane								

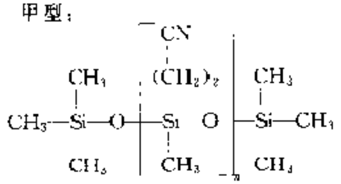
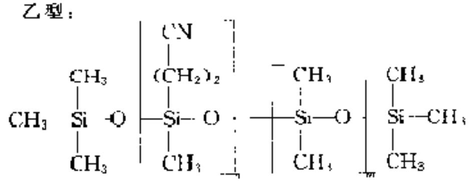
续表

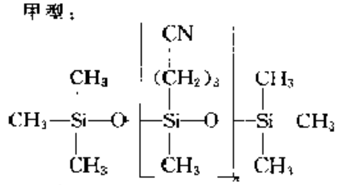
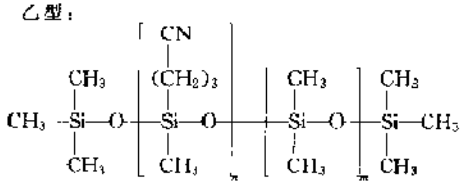
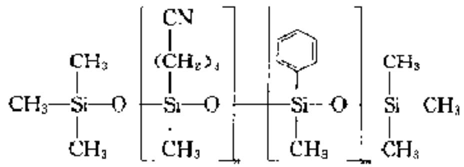
序号	中文名称	英文名称或商品名称	结构说明	供应者	溶剂	粘度/$mm^2 \cdot s^{-1}$ (20℃)	密度/$g \cdot cm^{-3}$	使用温度/℃		应用范围
								最低	最高	
6-(1)	聚三氟丙基硅氧烷	polytrifluoropropyl siloxane	甲型： 或乙型：							农药，氟利昂，氯代烃、氯代硅烷、亚硝胺、多元醇衍生物、咖啡因，硝基芳烃，甲糖衍生物、甾族化合物、农药
		OV-210	50%三氟丙基(甲型结构)	美国 Ohio Valley	A,C	10000	1.284 (25℃)	0	275	
		OV-202	50%三氟丙基(甲型结构)	美国 Ohio Valley	C,A	500	1.252	0	275	
		OV 215	50%三氟丙基(甲型结构)	美国 Ohio Valley	E,C	橡胶	1.284	0	275	
		SP2401	50%三氟丙基(甲型结构)	美国 Ohio Valley	A,C	700	1.26	0	275	
		QF-1(—QF-1-10065)	50%三氟丙基(甲型结构)	美国 Dow Corning	A,C	1000	—	50	200	
		FS 1265	50%三氟丙基(甲型结构)	美国 Dow Corning	—	10000		50	200	
		PS181	50%三氟丙基(甲型结构)	美国 Petrarch Systems		300	1.25			
		PS182	50%三氟丙基(甲型结构)	美国 Petrarch Systems		1000	1.28	—	-	
		PS183	50%三氟丙基(甲型结构)	美国 Petrarch Systems	—	10000	1.30			
		SKIFT-100	50%三氟丙基(甲型结构)	前苏联 Reakhim	-	橡胶	1.329	—	300	

续表

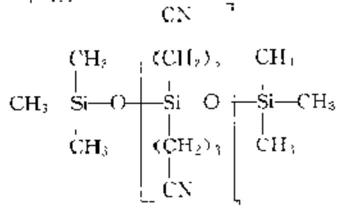
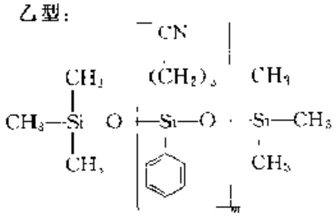
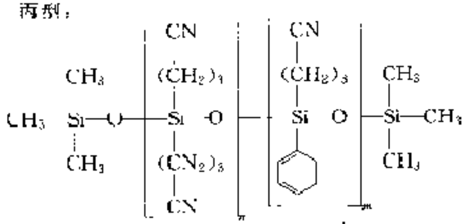
序号	中文名称	英文名称或商品名称	结构说明	供应者	溶剂	粘度/$mm^2 \cdot s^{-1}$ (20℃)	密度/$g \cdot cm^{-3}$	使用温度/℃		应用范围
								最低	最高	
6(1)	聚三氟丙基硅氧烷	FS 16	50%三氟丙基(甲型结构)	前苏联 Reakhim	—	40	1.21	—	150	农药、氟利昂、氯代烃、氯代硅烷、亚硝胺、多元醇衍生物、咖啡因、硝基芳烃、单糖衍生物、甾族化合物、农药
		FS 303	50%三氟丙基(甲型结构)	前苏联 Reakhim	—	1000～1500	1.33	—	160	
		NFS 100	50%三氟丙基(甲型结构)	前苏联 Reakhim	—	橡胶	1.329	—	—	
		FS-169	11.5%三氟丙基(乙型结构)	前苏联 Reakhim		15～60	1.1	—	—	
		FS-328	15.5%三氟丙基(乙型结构)	前苏联 Reakhim	—	65～120	1.1	—	—	
		SKIFT-25	12.5%三氟丙基(乙型结构)	前苏联 Reakhim	—	橡胶	1.065	—	300	
		SKIFT-50	25%三氟丙基(乙型结构)	前苏联 Reakhim		橡胶	1.15	—	300	
		SKIFT 50X	25%三氟丙基(乙型结构)	前苏联 Reakhim	—	橡胶	1.15	—	350	
		SKIFT-75	37.5%三氟丙基(乙型结构)	前苏联 Reakhim		橡胶	1.24	—	350	
6-(2)	聚甲基三氟丙基,甲基乙烯基硅氧烷	polymethyl-trifluoropropyl methyl vinyl siloxane								
		OV-215 vinyl	49%三氟丙基,1%乙烯基	美国 Ohio Valley		橡胶	—	—	250	
		LSX-3-0259	49.5%三氟丙基,0.5%乙烯基	美国 Dow Corning	A	橡胶	—	—	250	
		Silastic LS 24 (—Silastic DC-24)	49.5%三氟丙基,0.5%乙烯基	美国 Dow Corning	—	橡胶	—	—	—	
		PS 286	49%三氟丙基,1%乙烯基	美国 Petrarch Systems		—	—	—	—	
7	聚氰代烷基硅氧烷	polycyanoalkyl siloxane								

续表

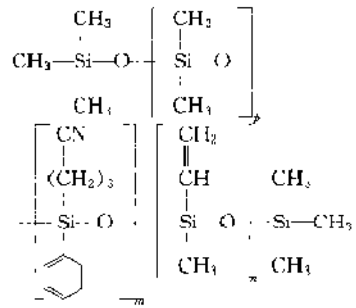
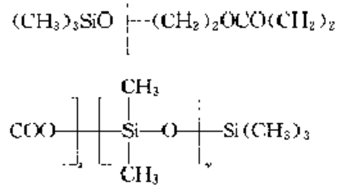
序号	中文名称	英文名称或商品名称	结构说明	供应者	溶剂	粘度/ $mm^2 \cdot s^{-1}$ (20 ℃)	密度/ $g \cdot cm^{-3}$	使用温度/℃		应用范围
								最低	最高	
7(1)	聚氰乙基硅氧烷	polycyanoethyl siloxane	甲型： 乙型：							脂肪酸甲酯、碳硼烷、内烯酰胺、含磷农药、可卡因、米酚、芳胺
		XF 1150	50%氰乙基(甲型结构)	美国 General Electric	A		—	0	150	
		NPS-100	50%氰乙基(甲型结构)	前苏联 Reakhim	–	1340	1.09	—	220	
		NSKT-100	50%氰乙基(甲型结构)	前苏联 Reakhim	—	橡胶	—		300	
		XF 1105	5%氰乙基(乙型结构)	美国 General Electric	—	—	—	—	—	
		XF-1112	12%氰乙基(乙型结构)	美国 General Electric		橡胶		·	—	
		XF-1125	25%氰乙基(乙型结构)	美国 General Electric	—	–	—	20	270	
		XE-60	25%氰乙基(乙型结构)	美国 General Electric	A,C,D	橡胶	1.08	0	250	
		NPS 25	12.5%氰乙基(乙型结构)	前苏联 Reakhim	-	80	0.998	·	300	
		NPS-50	25%氰乙基(乙型结构)	前苏联 Reakhim	—	350	1.05	—	250	
		NSKT-25	12.5%氰乙基(乙型结构)	前苏联 Reakhim	-	橡胶	·		300	
		NSKT-33	16.5%氰乙基(乙型结构)	前苏联 Reakhim	-	橡胶	—	—	300	
		NSKT-50	25%氰乙基(乙型结构)	前苏联 Reakhim	—	橡胶	—	—	300	

序号	中文名称	英文名称或商品名称	结构说明	供应者	溶剂	粘度/$mm^2 \cdot s^{-1}$ (20℃)	密度/$g \cdot cm^{-3}$	使用温度/℃ 最低	使用温度/℃ 最高	应用范围
7(2)	聚氰丙基硅氧烷	polycyanopropyl siloxane	甲型： 乙型：							低沸点芳烃、农药、脂肪酸甲酯、兴奋剂、单糖、溶剂
		PS906	50%氰丙基(甲型结构)	美国 Petrarch Systems	—	4～5000		—	—	
		p-NSKT-100	50%氰丙基(甲型结构)	前苏联 Reakhim	·	橡胶	—	—		
		PS908	45%氰丙基(乙型结构)	美国 Petrarch Systems	—	—	1.096	—	—	
		OV 105	5%氰丙基(乙型结构)	美国 Ohio Valley	A	1500	—	0	275	
		OE-4178	35%氰丙基(乙型结构)	德国 Chem. Works			—		--	
7-(3)	聚氰丙基，苯基硅氧烷	polycyanopropyl, phenyl siloxane								多环芳烃、硝基芳烃、酚、醇、多氯联苯、联苯胺、酯、氯代烃、甘油三酸酯、单糖衍生物、甾族化合物、吡啶、马尿酸、红霉素、卤代烃、含氯农药
		OV-225	25%氰丙基，25%苯基	美国 Ohio Valley	—	9000	1.096	0	265	
		ASI-25	25%氰丙基，25%苯基	美国 Applied Sci. Labs.	—	--	—		—	
		PS-910	25%氰丙基，25%苯基	美国 Petrarch Systems		2000		—	—	

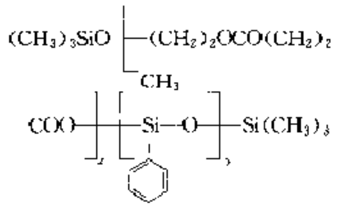
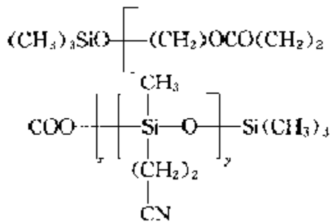
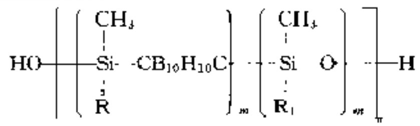
续表

序号	中文名称	英文名称或商品名称	结构说明	供应者	溶剂	粘度/ $mm^2\cdot s^{-1}$ (20 ℃)	密度 $g\cdot cm^{-3}$	使用温度/℃ 最低	使用温度/℃ 最高	应用范围
7-(1)	聚二氰丙基、氰丙基苯基硅氧烷	polydicyanopropyl, cyanopropyl phenyl siloxane	甲型： 乙型： 丙型：							有机酸衍生物、农药、硝基芳烃、丙烯腈、卤代烃、卤代醚、维生素 K_3、马尿酸、单糖衍生物、避孕药、抗癫痫药、抗组胺药、二噁嗪
		Silar 10C	100％氰丙基(甲型结构)	美国 Applied Sci. Labs.	—		1.13	50	275	
		SP 2340	100％氰丙基(甲型结构)	美国 Supelco		—	—		—	
		Silar 5CP	50％氰丙基，50％苯基(乙型结构)	美国 Applied Sci. Labs.	A、C		1.13	50	275	
		SP 2300	50％氰丙基，50％苯基(乙型结构)	美国 Supelco		-	--	50	275	
		Silar 7CP	75％氰丙基，25％苯基(丙型结构)	美国 Applied Sci. Labs.	C	—	---	50	275	

续表

序号	中文名称	英文名称或商品名称	结构说明	供应者	溶剂	粘度/$mm^2 \cdot s^{-1}$ (20℃)	密度/$g \cdot cm^{-3}$	使用温度/℃ 最低	使用温度/℃ 最高	应用范围
7(1)	聚二氰丙基,氰丙基苯基硅氧烷	Silar 9CP	90%氰丙基,10%苯基(丙型结构)	美国 Applied Sci. Labs.	C			50	275	
		SP 2310	75%氰丙基,25%苯基(丙型结构)	美国 Supelco	A			50	275	
		SP 2330	90%氰丙基,10%苯基(丙型结构)	美国 Supelco	C、A	—	—	50	275	
7-(5)	聚氰丙基,苯基,乙烯基硅氧烷	polycyanopropyl phenyl, vinyl siloxane								醇、卤素化合物、酸性药物
		OV-1701	7%氰丙基,7%苯基,0.5%乙烯基	美国 Ohio Valley	A	橡胶		20	300	
8	聚酯硅氧烷	polyester silones	—	—	—	—	—			
8(1)	甲基硅氧烷与聚乙二醇丁二酸酯的共聚物	Copolymer of methyl siloxane and polyethylene glycol succinate								脂肪酸酯
		EGSS-X	低硅含量,$x>y$	美国 Applied Science Labs	C		—	90	200	
		EGSS-Y	高硅含量,$x<y$	美国 Applied Science Labs	—	.	—	—	—	

续表

序号	中文名称	英文名称或商品名称	结构说明	供应者	溶剂	粘度/ $mm^2 \cdot s^{-1}$ (20 ℃)	密度/ $g \cdot cm^{-3}$	使用温度/℃		应用范围
								最低	最高	
8 (2)	甲基苯基硅氧烷与聚乙二醇丁二酸酯共聚物	Copolymer of methyl phenyl siloxane and polyethylene glycol succinate								芳烃、卤代烷、胺
		EGSP-A	低硅含量，$x>y$	美国 Applied Science Labs	—	—	—	—	—	
		EGSP Z	高硅含量，$x<y$	美国 Applied Science Labs	C	—	-	50	230	
8 (3)	氰乙基甲基硅氧烷与聚乙二醇丁二酸酯共聚物	Copolymer of cyanoethyl methyl siloxane and polyethylene glycol succinate								
		ECNSS-S	低硅含量，$x>y$	美国 Applied Science Labs	-			-		
		ECNSS-M	高硅含量，$x<y$	美国 Applied Science Labs	C	—	—	30	180	
9	聚碳硼烷硅氧烷	polycarborane siloxane								C_{14}～C_{60}烃、双萜烷、重油、甘油三酸酯、甾醇、金属络合卟啉、安静药、肝炎药、芳烃、粗榧生物碱、甘草、甘油添加剂、聚乙烯、模拟蒸馏、多氯联苯

续表

序号	中文名称	英文名称或商品名称	结构说明	供应者	溶剂	粘度/$mm^2 \cdot s^{-1}$ (20 ℃)	密度/$g \cdot cm^{-3}$	使用温度/℃		应用范围
								最低	最高	
9	聚碳硼烷硅氧烷	Dexsil-300	$R=R_1=CH_3, m=1, n\approx 50$	美国 Olin 及 Analabs	C		—	40	400	C_{14}～C_{60}烃、双萜烷、重油、甘油三酸酯、甾醇、金属络合卟啉、安静药、肝炎药、芳烃、粗植物碱、甘草、甘油添加剂、聚乙烯、模拟蒸馏、多氯联苯
		Dexsil-400	$R=C_6H_5, R_1=CH_3$	美国 Olin 及 Analabs	C			50	375	
		Dexsil-410	$R=$2-氰乙基$, CH_3, R_1=CH_3$	美国 Olin 及 Analabs	C			50	360	
		PS 097	$R=R_1=CH_3$	美国 Petrarch Systems	—	—	—	—	—	
		PS 098	$R=R_1=CH_3$	美国 Petrarch Systems	—	—	—	—	—	
		KBS-2	$R=R_1=CH_3, m=2, n\approx 1000$	前苏联 Reakhim			—	40	450	
		KBS 3	$R=R_1=CH_3, m=3, n\approx 1000$	前苏联 Reakhim	—	—	—	40	450	
		KBS 2F	$R=CH_3, R_1=C_6H_5$	前苏联 Reakhim		—	—	40	450	
		KBS-3F	$R=CH_3, R_1=C_6H_5$	前苏联 Reakhim	--		—	40	450	
10	聚氨基烷基硅氧烷	polyaminoalkyl siloxane								
	N-β-氨基乙基-γ-氨基丙基三(甲氧基)硅烷	N-β-aminoethyl-γ-aminopropyltrimethoxysilane Z 6020		美国 Dow Corning	—	10.0	1.01	-	—	
		A-1120	$NH_2(CH_2)_2NH(CH_2)_3Si(OCH_3)_3$	美国 Union Carbide Corp		6.5	1.04	—	—	
		KBM 603		日本 Shin-Etsu Chemical Industries	—	6.0	1.03	—	—	
	γ-氨基丙基三(乙氧基)硅烷	γ-aminopropyl triethoxysilane A1100	$NH_2(CH_2)_3Si(OC_2H_5)_3$	美国 Dow Corning	—	1.6	0.94	--		
	N-烯丙基-γ-氨基丙基三(甲氧基)硅烷	N-allyl-γ-aminopropyltrimethoxysilane X12-563	$CH_2=CH-CH_2-NH(CH_2)_3Si(OCH_3)_3$	日本 Shin-Etsu Chemical Industries	—	—	0.975	—	—	

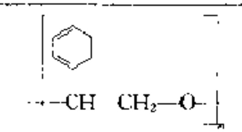
续表

序号	中文名称	英文名称或商品名称	结构说明	供应者	溶剂	粘度，$mm^2 \cdot s^{-1}$（20℃）	密度，$g \cdot cm^{-3}$	使用温度，℃ 最低	使用温度，℃ 最高	应用范围
10	γ-吗啉基丙基三（甲氧基）硅烷	γ mophinyl propyltrimethoxysilane X12-570	$O(CH_2CH_2)_2N-(CH_2)_3-Si(OCH_3)_3$	日本 Shin Etsu Chemical Industries			1.05			
	N，N-二甲基-γ-氨基乙氧基甲基聚硅氧烷	N，N-dimethyl-γ aminoethoxymethyl polysiloxane S4150/11	$(CH_3)_2-N-(CH_2)_2-O-Si(CH_3)_2-O-CH_3$	英国 Imperial chemical Industries	—		—	—		
11	其他硅油、硅脂及硅橡胶	DC-730	100%乙基	美国 Dow Corning	—	—	—	—	-	
		PS914	100%乙基	美国 Petrarch System	-	—	-		—	
		PES-5	100%乙基	前苏联 Reakhim	-	200～500	1±0.02	-	-	
		PES S 1(132-24)	100%乙基	前苏联 Reakhim	-	210～315	1±0.05			
		PES S-2(132 25)	100%乙基	前苏联 Reakhim		180～305	1±0.05		—	
		PES V-2	100%乙基	前苏联 Reakhim	—	40～52	0.949		—	
		VKZh 94	100%乙基	前苏联 Reakhim		10～52	0.949		150	
		SKTE typeA	92%甲基，8%乙基	前苏联 Reakhim	—	橡胶	0.975		280	
		PS 140	50%甲基，50%辛基	英国 Petrarch System	—	500～800	0.907	·	—	
		L 525	硅油	美国 Analabs	-	—	—	—		
		X 525	硅油	美国 Analabs	—	—	—	—	—	
		SR-119	硅脂	美国 General Electric	—					
		Dow X2405	低苯基硅脂	美国 Dow Corning	-	100	—	—	—	
		DC 230	甲基硬脂酰基酯	美国 Dow Corning	—	1200～1600	-	—	—	
		F-157	硬脂酰基酯	美国 Dow Corning		10(50°)	-	-		
		S-2116	30%硬脂酰基	澳大利亚 Bevaloidyty	-	—	—		—	
		Copolymer 3	有机硅聚合体	前苏联 Reakhim	-		-			
		SKTA 1	苯基硅脂（结构与本表中序号3不同）	前苏联 Reakhim		橡胶	1.09		150	

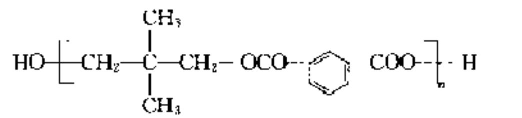
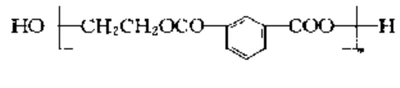
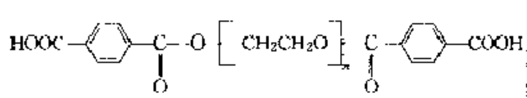
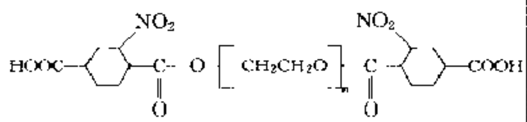
表 5-28 聚醇、聚醚类固定液

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
1	二甘油	diglycerol		$(CH_2OH-CHOH-CH_2)_2O$	M,C	20	150	醇、酮、苯胺、吡啶、脂肪胺、喹啉
2	二甘醇	diethylene glycol		$(HOCH_2CH_2)_2O$	C		50	醇、酮、苯胺、吡啶、脂肪胺、喹啉
3	三甘醇	triethylene glycol		$HO(CH_2CH_2O)_3H$	B,M	—	100	醇、酮、苯胺、吡啶、脂肪胺、喹啉
4	四甘醇	tetraethylene glycol		$(HO-CH_2CH_2OCH_2CH_2)_2O$	M	—	70	醇、酮、苯胺、吡啶、脂肪胺、喹啉
5	聚乙二醇	polyethylene glycol(PEG 后面数字表示平均分子量)	PEG200			0	75	低沸点芳烃、醇、酮、酸、酯、醛、醚、乙二醇、丙二醇、甘油、吡啶、胺、亚硝胺、单糖衍生物、卤代烃、卤代酚、胆汁酸衍生物、冰片、薄荷、精油、香料、蔬菜、鱼油、酒、茶、溶剂、烷基砷、苯乙烯、双甲脒
			PEG300			0	85	
			PEG400			20	100	
			PEG600			30	120	
			PEG1000	$HO(CH_2CH_2O)_nH$	A,C,D	40	150	
			PEG1500	$n=4\sim450$		50	85	
			PEG1540			50	165	
			PEG2000			50	175	
			PEG4000			60	120	
			PEG6000	PEG6000,20M 系聚环氧乙烷,$(-CH_2-CH_2-O-)_n$		60	120	
			PEG12000			60	200	
			PEG20M	($n=450$,平均分子量为 20,000)		60	250	
6	聚乙二醇	polyethylene glycol	Carbowax 200,300,400,600,1000,1500,1540,2000,4000,6000,12000,20M(美国 Union Carbide Co.,相当于同分子量的 PEG)	$HO(CH_2CH_2O)_nH$ $n=4\sim450$ Carbowax 6000,20M 系聚环氧乙烷,$(-CH_2CH_2-O-)_n$	A,C,D	60	250	低沸点芳烃、醇、酮、酸、酯、醛、醚、乙二醇、丙二醇、甘油、吡啶、胺、亚硝胺、单糖衍生物、卤代烃、卤代酚、胆汁酸衍生物、冰片、薄荷、精油、香料、蔬菜、鱼油、酒、茶、溶剂、烷基砷、苯乙烯、双甲脒

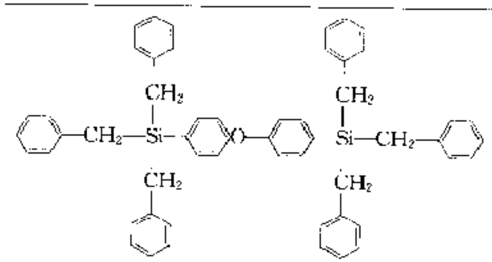
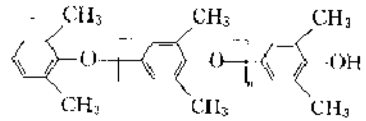
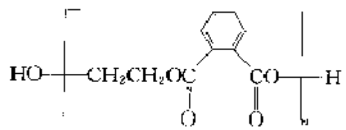
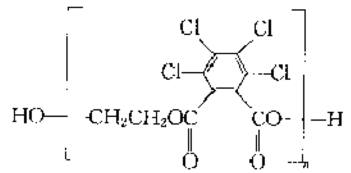
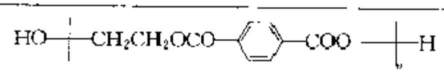
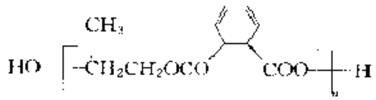
续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
7	聚乙二醇	polyethylene glycol	Superox20M Superox4	$M-20000$ $M=4000000$	C,M C	60 80	250 250	低沸点芳烃、醇、酮、酸、酯、醛、醚、乙二醇、丙二醇、甘油、吡啶、胺、亚硝胺、单糖衍生物、卤代烃、卤代酚、胆汁酸衍生物、冰片、薄荷、精油、香料、蔬菜、鱼油、酒、茶、溶剂、烷基砷、苯乙烯、双甲脒
8	聚丙二醇	polypropylene glycol	PPG425、1025、2025(美国 Union Carbide)	$HO[CH_2CH(CH_3)O]H$ 数字表示分子量	C	20～70	125～200	
9	聚(乙二醇-丙二醇)	poly(ethylene glycol propylene glycol)	Pluracol P2010	$HO[CH_2CH_2O]_n[CH_2CH(CH_3)O]_mH$	—	—	—	
10	聚(乙二醇-丙二醇)	poly(ethylene glycol-propylene glycol)	Pluronic F-68、F-88,L-35,L 61,L 64,L-81,P-65,P-81,P-85	结构式同上,个位数×10－乙二醇链节%,例如 L-61 含 10%(CH_2CH_2O)				
11	聚(乙二醇丙二醇)	poly(ethylene glycol-propylene glycol)	Ucon LB-550X Ucon 50-HB-280X Ucon 50-HB-2000 Ucon 50-HB-5100 Ucon 75-H-90000 (美国 Union Carbide)	结构式同上,含 10%(CH_2CH_2O) 含 30%(CH_2CH_2O) 含 40%(CH_2CH_2O) 含 50%(CH_2CH_2O) 含 80%(CH_2CH_2O)20%$[CH_2CH(CH_3)O]$ LB 表示不溶于水,溶于石油醚,H 或 HB 为溶于水,不溶于石油醚,X 表示含抗氧剂	M M M M M	0 0 0 0 0	200 200 200 200 200	低沸点芳烃、硝基烷、烷基苯胺、液体烃、卤代烃
12	聚 1,4-丁二醇	polytetramethylene oxide	PTMO	$HO[(CH_2)_4O]_nCH_2CH_2CH_2CH_2OH$	B,D		230	
13	聚乙二醇辛基苯基醚	poly(ethylene glycol)monooctylphenyl ether	Triton X-100($m-10$)	$HO(CH_2CH_2O)_m$—C_6H_4—C_8H_{17}	M,A	50	200	
14	聚苯乙二醇	polystyrene oxide	Polyglycol 174……500(美国 Dow Chem. Co.)		D		100～200(随 M_r 增大而升高)	环烷烃、低沸点芳烃

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
15	聚表氯醇	Polyepichlorohydrin	Polyglycol166-450（美国 Dow Chem. Co.）					醇、酯、酮
16	聚乙二醇丁二酸氢酯（或马来酸氢酯）	Poly(ethylene glycol)disuccinate or dimaleate	STAP（steroid analysis phase）	$HOOCCH_2CH_2C\cdot O(CH_2CH_2O)_nCCH_2CH_2COOH$ 或 $HOOCCH{=}CHC\cdot O(CH_2CH_2O)_nCHC{=}CHCOOH$	—	100	225	专用于分析甾族的三甲基硅烷衍生物
17	聚甘油	polyglycerol		$HO{-}CH_2CH(OCH_2CH)_nOCHCH_2OH$（$CH_2OH$, CH_2OH, CH_2OH）或 $HOCH_2CHCH_2(OCH_2CHCH_2)_nOCH_2CHCH_2OH$（OH, OH, OH）	—	20	200	醇、二醇、酰胺
18	聚新戊二醇间苯二甲酸酯	polyneopentyglycolisophthalate			—	—	—	
19	聚乙二醇对苯二甲酸酯	polyethylene glycol terephthalate	EGTP		二甲基亚砜＋二甲替甲酰胺(1＋1)	—	—	
20	聚乙二醇20M与对苯二甲酸的反应产物	Carbowax 20M-terephthalic acid	Carbowax 20M-TPA		C、D、M	60	250	脂肪酸、甾族化合物、香料
21	聚乙二醇20M与2-硝基对苯二甲酸的反应产物	Carbowax 20M-2-nitroterephthalic acid	FFAP（美国 Varian Aerograph）OV-351 SP-1000		A、C、D	60	275	脂肪酸、醇、酯、酚、腈、香料、胺、低沸点芳烃、硝基苯、牛奶、蒴打万花油

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
22	4,4'-双(三苄基)硅烷二苯基醚	4,4'-bis(tribenzyl)silyl diphenylether			—	40	250	氯代苯、丙三醇
23	聚2,6-二甲基对苯醚	poly2,6-dimethyl-*p*-phenyl ether	PPO		—	—	180	永久性气体、气体烃
24	聚乙二醇邻苯二甲酸酯	Polyethylene glycol *o*-phthalate	HI-EFF 2G LAC 10R-744EGP		A,C	100	220	低沸点芳烃、杂环化合物、酯,甾族化合物
25	聚乙二醇四氯代邻苯二甲酸酯	polyethylene glycol tetrachlorophthalate	LAC-8R-772		—	120	210	不饱和十八碳酸甲酯、苯二甲酸酯、增塑剂
26	聚乙二醇间苯二甲酸酯	Polyethylene glycoliso-phthalate	HI EFF-2ELAC-745EGIP		C	50	210	甾族化合物
27	聚丙二醇邻苯二甲酸酯	polypropylene glycol phthalate	LAC-19R-922		—		—	

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
28	二苄醚	dibenzyl ether	DBE	$C_6H_5CH_2OCH_2C_6H_5$	A,Ee（无水）	20	50	卤代烃
29	乙氧基甾醇	ethoxysterol	Emulsogen WS32		—	-	—	
30	乙二醇单甲醚	ethylene glycol monomethyl ether	甲基溶纤剂 Methyl cellosolve	$HO—CH_2CH_2OCH_3$	E,Ee	—	50	
31	乙二醇单苄醚	ethylene glycol monobenzyl ether		$C_6H_5CH_2OCH_2CH_2OH$	E	—	80	
32	二甘醇单乙醚	diethylene glycol monoethyl ether	溶纤剂卡必醇 Carbitol	$HOCH_2CH_2OCH_2CH_2OC_2H_5$	A,B,C,E,M	—	60	
33	二甘醇二甲醚或双（2-甲氧乙基）醚	diethylene glycol dimethyl ether or bis (2-methoxyethyl) ether		$H_3COCH_2CH_2OCH_2CH_2OCH_3$	—	—	50	气体烃
34	二甘醇二乙醚	diethylene glycol diethyl ether		$C_2H_5OCH_2CH_2OCH_2CH_2OC_2H_5$	E	—	30	类似聚乙二醇
35	四甘醇二甲醚	tetraethylene glycol dimethyl ether		$CH_3(OCH_2CH_2)_4OCH_3$	A,C,D,M	20	80	类似聚乙二醇
36	六甘醇二甲醚	hexaethylene glycol dimethyl ether		$CH_3(OCH_2CH_2)_6OCH_3$	A,M	—	100	类似聚乙二醇
37	聚乙二醇醚	polyethylene glycol ether	Carbowax 350,550,750 等（美国 Union Carbide）	$R(OCH_2CH_2)_nOR$ $R=CH_3, n=2$ $R=CH_3, n=4$ $R=CH_3, n\approx 20$ $R=C_{18}H_{37}$	A,C,D	—	50 80 100 200	醇、酮、胺
38	聚乙二醇醚	polyethylene glycol ether	Lubrol MO（英国 I. C. I. Co）		A,C,D,T	—	200	醇、酮、胺

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
39	十三烷醇与环氧乙烷的反应产物	Product from reaction of tridecyl alcohol and ethylene oxide	Surfonic TD300	$HO\left[CH_2CH_2O\right]_n C_{13}H_{27}$	—	—	—	
40	聚乙二醇十八醚	polyethylene glycol dioctadecyl ether	Emulphor ON 870 (-810)	$C_{18}H_{37}(OCH_2CH_2)_nOC_{18}H_{37}$	M,C	40	200	低沸点芳烃、杂环化合物、磷化物、酚、精油
41	聚乙二醇-单辛基苯基醚	polyethylene glycol monooctylphenyl ether	Triton x 305(美国Rohm & Hass Co.)	$C_8H_{17}C_6H_4O(CH_2CH_2O)_nH$ $n=30$	A,C,D,M	50	200	液体烃、醇、酮、酯、胺、吡啶、酯、气体硫化合物
42	庚二醇-单异壬基苯基醚	heptaglycol monoisononyl phenyl ether	Marlophen87(德Chemische werke Hüls AG)	—	—	—	180	醚
43	聚乙二醇壬基苯基醚	poly(ethylene glycol)mononony phenyl ether 或 nonyl phenoxy polyethylene oxyethanol	Lubrol L, Igepal CO-210,-530,-630,710,880,990(所含环氧乙烷克分子数随数字增大而增加)	$C_9H_{19}C_6H_4O(CH_2CH_2O)_nH$ CO 210:壬基苯醚+1.5mol 环氧乙烷 -530:壬基苯醚+6mol 环氧乙烷 -630:壬基苯醚+(9~10)mol 环氧乙烷 -710:壬基苯醚+(10~11)mol 环氧乙烷 -880:壬基苯醚+30mol 环氧乙烷	A,D,M,C(加热)	100	200	液体烃、吡啶、胺、醇、酯、酮、硫醇、硫醚
44	壬基酚与环氧乙烷的加合物	nonylphenol-ethylene oxide adduct	Surfonic N300 Tergital NP 35Tergital NPX	NP 35:壬基酚·15mol 环氧乙烷	A,C,M,T	100	200	液体烃、吡啶、胺、醇、酯、酮、硫醇、硫醚
45	聚环氧乙烷烷基芳基醚	polyoxyethylene alkaryl ether	Renex 678,688,690	(分别含 5,8,10mol 的环氧乙烷)	A,C,D	—	—	
46	甘油壬基苯基醚	1-nonylphenoxy 2,3-propanediol 或 nonyl phenyl glycerine ether		$C_9H_{19}C_6H_4OCH_2CHOHCH_2OH$	A,C,D	—	220	醇、酯、酮
47	壬基酚聚乙二醇醚	nonylphenol polyethylene glycol ether	Dowfox 9N15 9N9		A,C	—	150	
48	烷基酚与环氧乙烷的缩合物	alkylphenyl ethylene oxide condensate	Nonidet P40		M	—	190	醇、酮、酯

续表

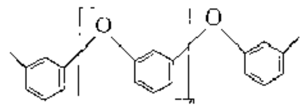
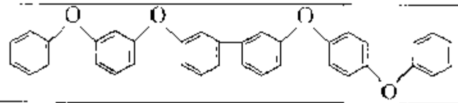
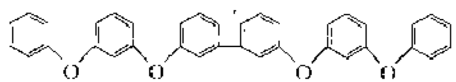
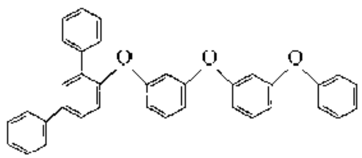
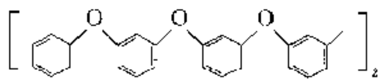
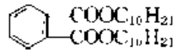
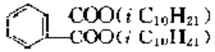
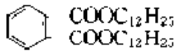
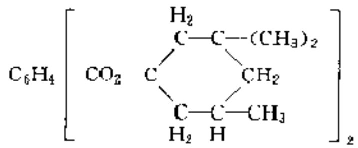
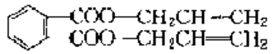
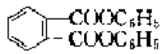
序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
49	环氧树脂	epoxy resin	Epon 1001 Epikote 728	环氧氯丙烷与双酚 A 的缩合物	A,C(热)	50	200	低沸点芳烃
50	环氧增塑剂	epoxy plasticizer	Estynox 100 300		C C	0 0	175 300	
51	聚间苯醚	poly *m* phenyl ether 或 poly-*m*-phenoxylene	PPE-20 OS124 OS138 Polysev(美国 Monsanto-Chem. Co.)	 ($n=7$) ($n=3$) ($n=4$) ($n=5$)	A,C,D,T	0~50	200~400	低沸点芳烃、杂环化合物、多环芳烃、单糖衍生物、甾醇
52	聚苯醚	polyphenyl ether	PPEOS 124	(5Rings)	C,T	20	200	
			PPEOS-138	(6Rings)	—	20	250	
53	3,3-双(间位苯氧基苯氧基)联苯	3,3′-bis(*m*-phenoxy phenoxy)biphenyl				—	300	
54	3-(间位苯氧基苯氧基)3-(对位苯氧基苯氧基)联苯	3-(*m*-phenoxyphenoxy)-3-(*p* phenoxy phenoxy) biphenyl	—			—	300	
55	4-[间位-(间位苯氧基苯氧基)苯氧基]-间位-三联苯	4′-[*m*-(*m*-phenoxy phenoxy) phenoxy] m-terphenyl			—		—	
56	3,3′-双[间位-(间位苯氧基苯氧基)苯氧基]联苯	3,3′ bis [*m* (*m*-phenoxyphenoxy) pheroxy] biphenyl			—	—	—	
57	聚乙二醇十六烷苯醚	poly ethylene glycol hexadecyl ether	—	$C_{16}H_{33}O(CH_2CH_2O)_nH$	—		—	

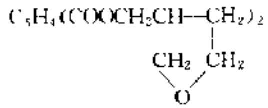
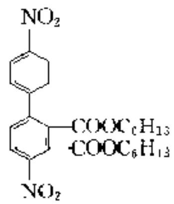
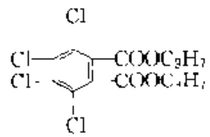
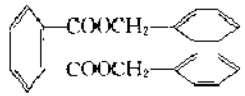
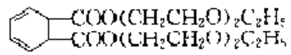
表 5-29　二酸酯及相应聚酯类固定液

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
1	邻苯二甲酸二甲酯	dimethyl phthalate		$COOCH_3$ / $COOCH_3$	A,D	—	90	不饱和烃、芳烃、醇、酮、醛、酯
2	邻苯二甲酸二乙酯	diethyl phthalate	DEP	$COOC_2H_5$ / $COOC_2H_5$	A,B,D,E		95	不饱和烃、芳烃、醇、酮、醛、酯
3	邻苯二甲酸二(正)丙酯	di-*n*-propyl phthalate		$COOC_3H_7$ / $COOC_3H_7$	A,D	—		不饱和烃、芳烃、醇、酮、醛、酯
4	邻苯二甲酸二异丙酯	di-isopropyl phthalate	DIDP	$COOCH(CH_3)_2$ / $COOCH(CH_3)_2$	A,D,M	20	100	不饱和烃、芳烃、醇、酮、醛、酯
5	邻苯二甲酸二(正)丁酯	di-*n*-butyl phthalate	DBP	$COOC_4H_9$ / $COOC_4H_9$	A,B,D,E	20	100	卤代烃、芳烃、醇、酮、醛、酯
6	邻苯二甲酸二己酯	dihexyl phthalate	—	$COOC_6H_{13}$ / $COOC_6H_{13}$	A,D	—	—	
7	邻苯二甲酸二庚酯	diheptyl phthalate	—	$COOC_7H_{15}$ / $COOC_7H_{15}$	A,D	—	120	
8	邻苯二甲酸丁辛酯	butyloctyl phthalate	—	$COOC_4H_9$ / $COOC_8H_{17}$	M,D	—	—	
9	邻苯二甲酸二(正)辛酯	di-*n*-octyl phthalate	DOP	$COOC_8H_{17}$ / $COOC_6H_{27}$	A,D	—	150	氟利昂、C_1～C_{10}烷烃、芳烃、C_1～C_7硫醇、酮、醛、酯、醇
10	邻苯二甲酸二异辛酯	di isooctyl phthalate	Octoil	$COO(i\text{-}C_8H_{17})$ / $COO(i\text{-}C_8H_{17})$	A,C,D,M	0	150	
11	邻苯二甲酸二(2-乙基己酯)	di(2-ethylhexyl)-phthalate	-	$C_6H_4[COOCH_2CH(CH_2)_3CH_3]_2$ 其中 CH 上连 C_2H_5	D,M		150	
12	邻苯二甲酸二壬酯	di *n* nonyl phthalate	DNP	$COOC_9H_{19}$ / $COOC_9H_{19}$	A,C,D	20	150	SO_2气体、C_1～C_5气体烃、芳烃、醇、酮、酯、C_1～C_7硫醇、C_1～C_6硫醚
13	邻苯二甲酸二异壬酯	di-isononyl phthalate	--	$C_6H_4[COO(CH_2)_2CHCH_2C(CH_3)_3]_2$ 其中 CH 上连 CH_3	—		130	

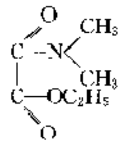
续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
14	邻苯二甲酸二(正)癸酯	di-*n*-decyl phthalate	DDP Convoil-20		A,C,M	50	150	液体烃、卤代烃
15	邻苯二甲酸二异癸酯	di-isodecyl phthalate	—		A,C,M	0	150	液体烃、卤代烃
16	邻苯二甲酸二月桂酯	didodecyl phthalate	dilanryl phthalate		A,C,M	—	150	
17	邻苯二甲酸二(十三酯)	ditridecyl phthalate	—	$C_6H_4(COOC_{13}H_{27})_2$	A,C,M		·	
18	邻苯二甲酸二环己酯	dicyclohexyl phthalate	—	$C_6H_4(COOC_6H_{11})_2$	—	--		
19	邻苯二甲酸二(3,3,5 三甲基环己酯)	di-(3,3,5-trimethyl-cyclohexyl)phthalate			—	—		
20	邻苯二甲酸二烯丙酯	diallyl phthalate	—		A,T	—	—	
21	邻苯二甲酸二苯酯	diphenyl phthalate	—		B	—	130	醇、酮、酯、胺、酚
22	邻苯二甲酸二-β苯基乙酯	di(β — phenylethyl phthalate)	—	$C_6H_4(COOC_2H_4C_6H_5)_2$	—	—	—	
23	邻苯二甲酸二(2-乙氧基乙酯)	di 2-ethoxyethyl phthalate	—	$C_6H_4(COOC_2H_4OC_2H_5)_2$	—	·	—	
24	邻苯二甲酸二(2-乙氧基乙氧基乙酯)	di(2 ethoxyethoxylethyl)phthalate	—	$C_6H_4(COOC_2H_4OC_2H_4OC_2H_5)_2$		—		
25	邻苯二甲酸二(2-丁氧基乙酯)	di(2-butoxyethyl)phthalate	--	$C_6H_4(COOC_2H_4OC_4H_9)_2$	C,M	20	175	液体烃

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃ 最低	使用温度/℃ 最高	应用范围
26	邻苯二甲酸二(四氢糠醇)酯	di(tetrahydrofurfuryl)phthalate			—		150	
27	3-硝基-6-(对硝基苯基)邻苯二甲酸二己酯	dihexyl 3-nitro-6-(*p*-nitrophenyl)phthalate	—			—	—	
28	四氯代邻苯二甲酸二正丙酯	di *n*-propyl-tetrachlorophthalate			A,M	27	75	烯烃、芳烃、酮
29	四氯代邻苯二甲酸二丁酯	dibutyl-tetrachlorophthalate	DBTCP	$C_6Cl_4(COOC_4H_9)_2$	A,M,C	20	100	
30	四氯代邻苯二甲酸(2-乙基)己酯	di (2-ethylhexyl) tetrachlorophthalate	—	$C_6Cl_4[COOCH_2CH(C_2H_5)(CH_2)_3CH_3]_2$	A,D,M	0	150	
31	邻苯二甲酸二苄酯	dibenzyl phthalate			E,Ee	—	140	
32	邻苯二甲酸二卡必醇酯	dicarbitol phthalate	—		C	—	150	二异丙基苯异构体
33	四氯代邻苯二甲酸二异辛酯	di-isooctyl tetrachlorophthalate	—	$C_6Cl_4[COO(i\text{-}C_8H_{17})]_2$	A,D,M	20	150	
34	四氯代邻苯二甲酸二壬酯	di *n* nonyl tetrachlorophthalate	DNTCP	$C_6Cl_4(COOC_9H_{19})_2$	A,D,M	—	195	

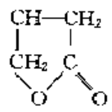
续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
35	对苯二甲酸二(正)丙酯	di-*n*-propyl terephthalate	—		—	—	—	二甲苯
36	N,N-二甲基草氨酸乙酯	ethyl *N*,*N*-dimethyl oxamate	—		E,Ee	0	30	
37	草酸二丁酯	dibutyl oxalate		$COOC_4H_9$ $COOC_4H_9$	E,Ee	—	30	
38	丙二酸二乙酯	diethyl malonate		$CH_2(COOC_2H_5)_2$	B,C,E	—	—	
39	丁二酸二异丙酯	di-isopropyl succinate	—	$(CH_3)_2CHOOCCH_2CH_2COOCH(CH_3)_2$	A	—	40	
40	丁二酸二(正)丁酯	di-*n* butyl succinate		$C_4H_9OOCCH_2CH_2COOC_4H_9$	A	—	120	丙烯
41	丁二酸二异辛酯	di isooctyl succinate		$[-CH_2COO(i\text{-}C_8H_{17})]_2$	A		150	
42	顺丁烯二酸二甲酯	dimethyl maleate		$CHCOOCH_3$ ‖ $CHCOOCH_3$	A,C	0	50	卤代烃
43	顺丁烯二酸二异辛酯	di-isooctyl maleate	—	$CHCOO(i\text{-}C_8H_{17})$ ‖ $CHCOO(i\text{-}C_8H_{17})$	A	—	150	
44	己二酸二正辛酯	di-*n*-octyl adipate	Flexol A-26	$(-CH_2CH_2COOC_8H_{17})_2$	A	—	135	硝基烷,低沸点醇、醇
45	己二酸二异辛酯	di isooctyl adipate		$[H_3C-(CH_2)_3-CH(C_2H_5)-H_2C-OOC-C_2H_4-]_2$	A,M	0	125	

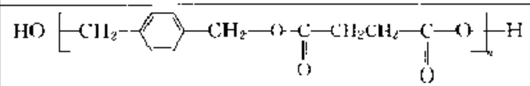
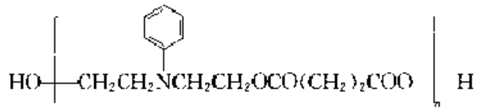
续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
46	丁二酸二乙酯	diethyl succinate		$C_2H_5OOCCH_2CH_2COOC_2H_5$	Ee	—	60	
47	丁二酸二异丁酯	diisobutyl succinate	—	—	—	—	50	
48	戊二酸新戊二醇酯	Neopentyl glycol glutarate	NPGG		—	—		
49	己二酸辛癸酯	octyl decyl adipate	—	$CH_2CH_2COOC_8H_{17}$ | $CH_2CH_2COOC_{10}H_{21}$	A	—	125	
50	己二酸二癸酯	di decyl adipate	—	$(—CH_2CH_2COOC_{10}H_{21})_2$	—	—	125	
51	己二酸二异癸酯	di isodecyl adipate		$[—CH_2CH_2COO(i\text{-}C_{10}H_{21})]_2$	M	−20	150	
52	己二酸二(2-甲氧乙酯)	bis-(2 methoxyethyl) adipate	BMA	$(—CH_2CH_2COOC_2H_4OCH_3)_2$	C,D	20	150	气体烃
53	己二酸二(2-乙氧乙酯)	bis-(2 ethoxyethyl) adipate	—	$(—CH_2CH_2COOC_2H_4OC_2H_5)_2$	C,D	0	150	
54	己二酸二(2-丁氧乙酯)	di (2-butoxyethyl) adipate	—	$(—CH_2CH_2COOC_2H_4OC_4H_9)_2$	D	20	—	
55	己二酸苄胺酯	benzylamine adipate	—	$C_6H_5CH_2NHOC(CH_2)_4COOH$	C		125	
56	癸二酸二丁酯	dibutyl sebacate	—	$(—CH_2CH_2CH_2CH_2COOC_4H_9)_2$	C,E,Ee	—	50	
57	癸二酸二正辛酯	di n octyl sebacate	—	$(—CH_2CH_2CH_2CH_2COOC_8H_{17})_2$	A,C,D	0	125	液体烃
58	癸二酸二异辛酯	di-isooctyl sebacate	Octoil S	$[—CH_2CH_2CH_2CH_2COO(i\text{-}C_8H_{17})]_2$	A,C,D	—	130	氯硫化合物、醇、酯、酮
59	癸二酸二(2-乙基己酯)	di-(2 ethylhexyl) sebacate	—	$[—C_4H_8COOCH_2CH(CH_2)_3CH_3]_2$ | C_2H_5 (on CH)	A,C,D	0	125	卤代烃、酯、醇

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
60	癸二酸二壬酯	di nonyl sebacate	—	$(-CH_2CH_2CH_2CH_2COOC_9H_{19})_2$	A	0	125	卤代烃、酯、醇
61	癸二酸二(2-乙氧基乙酯)	di-(2-ethoxyethyl)sebacate	—	$(-C_4H_8COOCH_2CH_2OC_2H_5)_2$	A	–	150	
62	柠檬酸三丁酯	tributyl citrate	Citroflex 4	$HO-C(CH_2COOC_4H_9)_2-COOC_4H_9$	M	—	150	
63	乙酰基柠檬酸三丁酯	acetyltributyl citrate	Citroflex A-4	$CH_3COO-C(CH_2COOC_4H_9)_2-COOC_4H_9$	A	20	180	芳烃
64	γ-丁内酯	γ butyrolactone	—		M	–	30	永久气体
65	*d*-酒石酸二乙酯	diethyl-d-tartrate	—	$HO-CHCOOC_2H_5$ / $HO-CHCOOC_2H_5$	M	—	75	醇
66	蜂蜡	bees wax	—	约含85%棕榈酸蜂花酯(Mellisyl Palmitate, $C_{15}H_{31}COOC_{30}H_{61}$)和12%蜡酸(Cerotic acid, $C_{25}H_{51}COOH$)	C	—	200	酯
67	聚乙二醇丁二酸酯	ethylene glycol succinate(或称 polyethylene glycol succinate,一般略去 poly,下同)	HI-EFF-2B, LAC 4R-886, EGS	$HO(CH_2CH_2OCOCH_2CH_2COO)_nH$	A,C,D	50	180	癸烷与芳烃、苯甲醚、硒肮氨酸衍生物、磷化物、酯
68	聚二乙二醇丁二酸酯	diethylene glycol succinate	HI-EFF-1B, LAC-3R-728, DEGS Polyester A	$HO[(CH_2CH_2O)_2CO(CH_2)_2COO]_nH$	A,C,D	20	200	萘、烷基氯化汞、脂肪酸甲酯、精油、角油、硝基苯、脂肪酸、苯甲酸
69	聚1,4-丁二醇丁二酸酯	1,4-butanediol succinate	HI-EFF-4B, LAC-6R-860, BDS Craig's Polyester	$HO[(CH_2)_4OCOCH_2CH_2COO]_nH$	C,D	50	230	脂肪酸、脂肪酸酯

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
70	聚新戊二醇丁二酸酯	neopentyl glycol succinate	HI-EFF-3B, LAC-18R 767、NGS、NPGS	$HO(CH_2-C(CH_3)_2-CH_2OCOCH_2CH_2COO)_nH$	A,C,D	50	240	甾族化合物、卤化物、烷基非
71	聚四甲基环丁二醇丁二酸酯	tetramethylcyclobutanediol succinate	HI-EFF-9B		C	-	250	
72	聚环己烷二甲醇丁二酸酯	cyclohexanedimethanol succinate	LAC-12R 746、LAC 796, HI EFF 8B、CHDMS、		C	100	250	甾族化合物
73	聚苯基二乙醇胺丁二酸酯	phenyldiethanolamine succinate	HI EFF 10B、PDEAS		A,C	20	230	生物碱
74	聚乙二醇顺丁烯二酸酯	ethylene glycol maleate	PEGMe	—	A		175	酯
75	聚乙二醇羟基丁二酸酯	ethylene glycol malate	PEGMa	—	A		175	
76	聚乙二醇戊二酸酯	ethylene glycol glutarate	LAC-731	$HO[CH_2CH_2OCO(CH_2)_3COO]_nH$	C	50	200	精油
77	聚乙二醇二(戊二酸酯)	ethylene glycol diglutarate	—	$HOOC(CH_2)_3CO(OCH_2CH_2)OCO(CH_2)_3COOH$	—			
78	聚乙二醇己二酸酯	ethylene glycol adipate	HI-EFF-2A、LAC-13R-741、LAC-741、PEGA、Reoflex 400	$HO[CH_2CH_2OCO(CH_2)_4COO]_nH$	A,C,D(热)	100	200	硝基氯苯、有机酸、酯、酮、硫化物、酚
79	聚二甘醇己二酸酯	diethylene glycol adipate	HI-EFF-1A、LAC-1R 296、DEGA	$HO[(CH_2CH_2O)_2CO(CH_2)_4COO]_nH$	A,C,D	20	210	苯乙烯、酚、二氯邻酰氯
80	二甘醇己二酸酯与季戊四醇部分交链产物	diethylene glycol adipate partly crosslinked with pentaerythritol	LAC-2R-446		A,C,D	20	200	氧化物、精油、酯

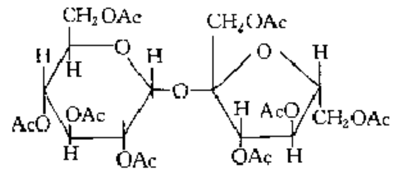
续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度,℃		应 用 范 围
						最低	最高	
81	聚1,2-丙二醇己二酸酯	1,2 propylene glycol adipate	LAC-471,Reoplex 400,PGA,Resoflex	$HO\left[CH(CH_3)CH_2OCO(CH_2)_4COO\right]_nH$	A,C,D	50	210	烷基噻吩、芳烃、多环芳烃、酯、有机酸
82	聚1,4丁二醇己二酸酯	1,4-butanedioladipate	HI EFF-4A,BDA	$HO\left[(CH_2)_4OCO(CH_2)_4COO\right]_nH$	A,C	60	200	醇、酮、酯
83	聚新戊二醇己二酸酯	neopentyl glycol adipate	HI-EFF-3A,LAC 9R-769,NPGA	$HO\left[CH_2C(CH_3)_2CH_2OCO(CH_2)_4COO\right]_nH$	A,C,D	150	230	除草剂、酯、甾族化合物
84	聚四甲基环丁二醇己二酸酯	tetramethyl cyclobutanediol adipate	HI EFF-9A, TMCBA		C		250	
85	聚环己烷二甲醇己二酸酯	cyclohexanedimethanol adipate	HI-EFF-8A		C	-	250	甾族化合物
86	聚乙二醇-γ酮基庚二酸酯	ethylene glycol-γ-keto-pimelate			-	—	曾使用216	醇、酮、酯
87	聚新戊二醇壬二酸酯	neopentyl glycol azelate		$HO\left[CH_2C(CH_3)_2CH_2OCO(CH_2)_4COO\right]_nH$		—	—	
88	聚乙二醇癸二酸酯	ethylene glycol sebacate	HI-EFF-2C,LAC-14R-743	$HO\left[CH_2CH_2OCO(CH_2)_8COO\right]_nH$	C	100	200	
89	聚二甘醇癸二酸酯	diethylene glycol sebacate	LAC-15R-806,DEGSB	$HO\left[(CH_2CH_2O)_2CO(CH_2)_8COO\right]_nH$	A,C	80	225	苯乙烯氯化物
90	聚1,3-丙二醇癸二酸酯	1,3 propylene glycol sebacate	Hercoflex 600,Harflex 370,Reoplex 100	$HO\left[CH(CH_3)CH_2OCO(CH_2)_8COO\right]_nH$	C	20	200	

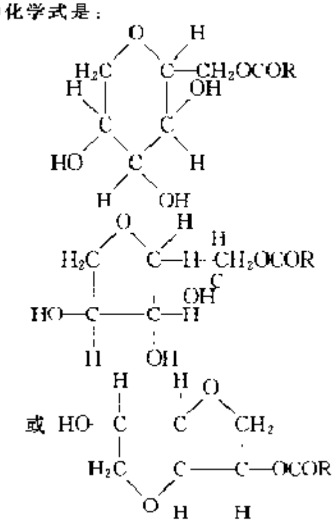
续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
91	聚1,4-丁二醇癸二酸酯	1,4 butylene glycol sebacate	—	$HO-[CH(CH_2)_2CH_2-O-C(=O)-(CH_2)_8COO]_n-H$		—	200	
92	聚新戊二醇癸二酸酯	neopentyl glycol sebacate	HI-EFF 3C、LAC 17R-770、NPGS	$HO-[CH-C(CH_3)_2-CH_2OCO(CH_2)_8COO]_n-H$	C、D	50	250	芳烃、有机酸、甾族化合物、酯
93	丙二酸二丁酯	dibutyl malonate		$CH_2(COOC_4H_9)_2$	—	—	—	苯胺
94	邻苯二甲酸二(2-乙氧基乙氧基乙基)酯	bis-(2-ethoxyethoxyethyl)phthalate	—	$C_6H_4(COOCH_2CH_2OCH_2CH_2OC_2H_5)_2$	A、C		150	
95	四氯邻苯二甲酸二(2-乙基己基)酯	bis (2 ethyl hexyl)tetrachlorophthalate		—	A	0	150	
96	间苯二甲酸聚乙二醇酯	ethylene glycol isophthalate	—		C	100	200	
97	邻苯二甲酸聚乙二醇酯	ethylene glycol phthalate	—		C	100	200	
98	四氯邻苯二甲酸聚乙二醇酯	ethylene glycol tetrachloro-phthalate	—	—	C	120	200	
99	癸二酸聚丙二醇酯	polypropylene glycol sebacate	paraplex G-25, paraplex G-40			0	200	

表 5-30　其他有机酸酯及相应聚酯类固定液

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃ 最低	使用温度/℃ 最高	应用范围
1	乙酰乙酸乙酯	ethyl acetoacetate	丁酮酸乙酯	$CH_3-\underset{\underset{O}{\|}}{C}-CH_2-\underset{\underset{O}{\|}}{C}-OC_2H_5$	A、Ee	-	15	丁烯
2	二甘醇乙醚乙酸酯	diethylene glycol ethyl etheracetate	Carbitol acetate	$C_2H_5OC_2H_4OC_2H_4OCOCH_3$	E		125	
3	甘油三乙酸酯	glycerol triacetate	triacetin	CH_2OCOCH_3 | $CHOCOCH_3$ | CH_2OCOCH_3	C、M	20	60	
4	山梨糖醇六乙酸酯	sorbitol hexaacetate		$CH_3CO_2CH_2(CHOCOCCH_3)_4CH_2OCOCH_3$	—		100	
5	蔗糖八乙酸酯	sucrose octaacetate	SOA		E		>200	酯、醇
6	环糊精乙酸酯	cyclodextrin acetate			C		185	酯、醇
7	β-环糊精丙酸酯	β-cyclodextrinpro-pionate		$C_{105}H_{154}O_{56}$	—	170	210	
8	甘油三丁酸酯	tributyrin	三丁精	$CH_2OCOCH_2CH_2CH_3$ | $CHOCOCH_2CH_2CH_3$ | $CH_2OCOCH_2CH_2CH_3$	M	—	100	
9	乙酰蔗糖异丁酸酯	sucrose acetate isobutyrate	SAIB	$C_{12}H_{14}O_3(OCOCH_3)_2(OCOC_3H_7)_6$	A、C、D、T	30	200	萜烯

续表

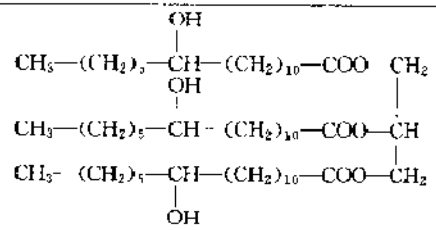
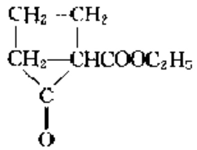
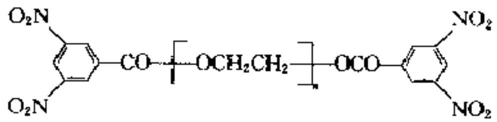
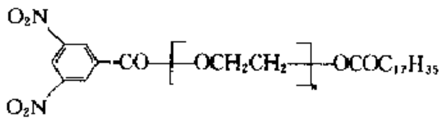
序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
10	丙烷三壬酸三甲酯	trimethyl propane-tripelargonate	纤烷丝酯 Celanese ester No. 9	$CH_2(CH_2)_8COOCH_3$ $CH(CH_2)_8COOCH_3$ $CH_2(CH_2)_8COOCH_3$	A,C	20	200	酚、酮、醛、酯
11	聚乙二醇单月桂酸酯	polyethylene glycol monolaurate	Nonex139	$C_{11}H_{23}COO(CH_2CH_2O)_nH$	E	—	100	
12	聚乙二醇-400单月桂酸酯	polyethylene glycol 400 monolaurate			E	—	100	
13	脱水山梨糖醇部分脂肪酯	sorbitan partial fatty esters	Atpet 80		C			
14	(脱水)山梨糖醇单月桂酸酯	sorbitan monolaurate	Span 20, Arlacel 20	Span 的化学式是：  式中 R 为脂肪酸的基团	—	—	—	
	(脱水)山梨糖醇单棕榈酸酯	sorbitan monopal-mitate	Span40, Arlacel 40		—	—	—	
	(脱水)山梨糖醇单硬脂酸酯	sorbitan monostea rate	Span60, Arlacel 60		M,C	15	150	
	(脱水)山梨糖醇三硬脂酸酯	sorbitan tristearate	Span65, Arlacel 65					
	(脱水)山梨糖醇倍半油酸酯	sorbitan sesquioleate	Span83, Arlacel 83				—	
	(脱水)山梨糖醇三油酸酯	sorbitan trioleate	Span85, Arlacel 85				—	
	(脱水)山梨糖醇单油酸酯	sorbitan monooleate	Span80, Arlacel 80		M,T,C	20	150	

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
15	季戊四醇四棕榈酸酯	pentaerythritol tetrapalmitate	—	$C(CH_2OCOC_{15}H_{31})_4$	C		200	
16	硬脂酸丁酯	butryl stearate	—	$C_{17}H_{35}COOC_4H_9$	E,Ee			
17	硬脂酸丁氧基乙酯	butoxyethyl stearate	—	$C_{17}H_{35}COOC_2H_4OC_4H_9$				
18	二甘醇硬脂酸酯	diethylene glycol stearate	LAC-16R-897	$C_{17}H_{35}COO(CH_2CH_2O)_2H$	C	—	175	
19	聚乙二醇单硬脂酸酯	polyethylene glycol-monostearate	Ethofat60/25	$C_{17}H_{35}COO(CH_2CH_2O)_nH$ 平均 $n=15$ 平均分子量=938	A,E,C,D(热)	50	175	甲酚、醇、酮、醛、酯
20	聚乙二醇400单硬脂酸酯	polyethyleneglycol 400 monostearate		$C_{17}H_{35}COO(CH_2CH_2O)_nH$	A,E	—	120	
21	聚乙二醇1000单硬脂酸酯	polyethyleneglycol 1000 monostearate	—	$C_{17}H_{35}COO(CH_2CH_2O)_nH$	C	—	150	
22	聚乙二醇1500单硬脂酸酯	polyethyleneglycol 1500 monostearate	—	$C_{17}H_{35}COO(CH_2CH_2O)_nH$	C		200	
23	聚乙二醇4000单硬脂酸酯	polyethylene glycol 4000 monostearate	—	$C_{17}H_{35}COO(CH_2CH_2O)_nH$	A,E		220	
24	聚环氧乙烷脱水山梨糖醇单月桂酸酯	polyoxyethylene sorbitan monolaurate	Tween 20		M	20	150	精油
25	聚环氧乙烷脱水山梨糖醇单油酸酯	polyoxyethylene sorbitan monooleate	Tween 80	$C_5H_8O_4—O—[CH_2CH_2O]_n—C(=O)—C_{17}H_{33}$	C,D,M	0	160	卤代醇、含氧化合物
26	聚环氧乙烷山梨糖醇单棕榈酸酯	polyoxyethlene sorbitan monopalmitate	Tween 40	—	—	—	200	

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
26	聚环氧乙烷山梨糖醇单硬脂酸酯	polyoxyethylene sorbitan monostearate	Tween 60	—	—		—	
	聚环氧乙烷山梨糖醇三硬脂酸酯	polyoxyethylene sorbitan tristearate	Tween 65	—			—	
27	甘油单硬脂酸酯	glycerin monostearate	α-monostearin	CH_2OH $\vert$ $CHOH$ $\vert$ $CH_2-C(=O)-OC_{17}H_{35}$	E(热)，Ee	—	125	醇、酮、酯
28	甘油三硬脂酸酯	glycerin tristearate	硬脂精 Stearin	$CH_2OCOC_{17}H_{35}$ $\vert$ $CHOCOC_{17}H_{35}$ $\vert$ $CH_2OCOC_{17}H_{35}$	B,E(热)	—	125	
29	乙二醇二硬脂酸酯	ethylene glycol distearate		$C_{17}H_{35}COOCH_2CH_2OCOC_{17}H_{35}$		—	250	
30	聚乙二醇二硬脂酸酯	polyethylene glycol distearate	Nonex 76	$C_{17}H_{35}CO[OCH_2CH_2]_nOCOC_{17}H_{35}$	—	—	>250	
31	油酸乙酯	ethyl oleate		$CH_3(CH_2)_7CH=CH(CH_2)_7COOC_2H_5$	E,M	—	120	
32	聚乙二醇400单油酸酯	polyethylene glycol 400 monooleate	Nonex30	$C_{17}H_{33}COO(CH_2CH_2O)_nH$	—	-	—	
33	甘油单油酸酯	glycerin monooleate	α-monoolein	CH_2OH $\vert$ $CHOH$ $\vert$ $CH_2OCOC_{17}H_{33}$	E,Ee		—	
34	聚乙二醇4000二油酸酯	polyethylene glycol 4000 dioleate		$C_{17}H_{33}CO[OCH_2CH_2]_nOCOC_{17}H_{33}$	C	60	220	

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
35	氢化蓖麻油	hydrogenated castor Oil	蓖麻蜡 Castor wax		C	90	200	精油
36	环戊酮甲酸乙酯	cyclopentanone carboxylic acid ethy lester				—	25	气体烃
37	苯甲酸乙酯	ethyl benzoate		$C_6H_5COOC_2H_5$	M	·	150	液体烃
38	苯甲酸苄酯	benzyl benzoate	—	$C_6H_5COOCH_2C_6H_5$	C	—	—	
39	乙二醇二苯甲酸酯	ethylene glycol dibenzoate	—	$C_6H_5COOCH_2CH_2OCOC_6H_5$				低沸点环烷
40	聚乙二醇三硝基苯甲酸酯	polyethylene glycol trinitrobenzoate	—	—	C	—	150	低沸点芳烃
41	聚乙二醇双(3,5-二硝基苯甲酸酯	polyethylene glycol bis-3,5-dinitrobenzoate	—		—		—	
42	聚乙二醇3,5-二硝基一苯甲酸酯单硬脂酸酯	polyethylene glycol3,5-dinitrobenzoate monstearate	—		—	—	—	
43	二乙二醇二苯甲酸酯	diethylene glycol dibenzoate	Flexol 2GB	$C_6H_5COO(CH_2CH_2O)_2COC_6H_5$	—	—	—	低沸点芳烃

续表

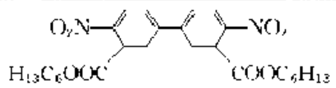
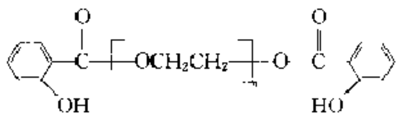
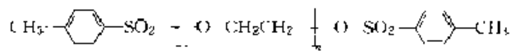
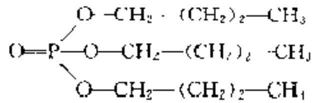
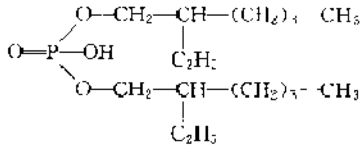
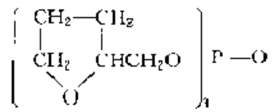
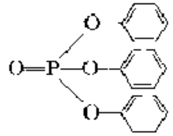
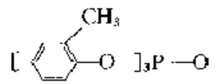
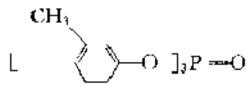
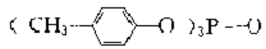
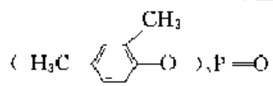
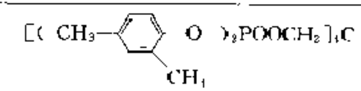
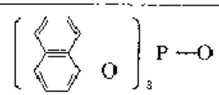
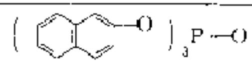
序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃ 最低	最高	应用范围
						最低	最高	
44	三乙二醇二苯甲酸酯	triethylene glycol dibenzoate		$C_6H_5COO(CH_2CH_2O)_3COC_6H_5$				低沸点芳烃
45	季戊四醇酯	pentaerythritol ester		$C(CH_2OCOR)_4$	—	—	—	C_{11}～C_{12}烷基四氢化萘
46	二硝基联苯酸二己酯	dinitrodiphenic acid dihexyl ester	—		—	—	—	
47	聚乙二醇二水杨酸酯	polyethylene glycol disalicylate	—		—	—	—	
48	聚乙二醇二甲苯磺酸酯	polyethylene glycol ditosylate	—		—	—	—	
49	ω-羟基硬脂酸	ω-hydroxystearic acid		$HO(CH_2)_{17}COOH$			—	
50	糊粉酸自聚物	aleuritic acid(9,10,15 trihydroxy palmitic acid)	—	$HOCH_2(CH_2)_5CH—CH(CH_2)_7COOH$ OH OH	—	—		萜烯
51	混合脂肪酸的聚甘油酯	polyglycerol ester of mixed fatty acids	Admul19(S-57)	—	—			
52	鲸蜡		Spermaceti			—		

表 5-31　无机酸酯与聚酯类固定液

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
1	磷酸三正丁酯	tri n butyl phosphate			B,C,D,Ee	20	120	含氧化合物
2	磷酸二(2-乙基己酯)	di-(2-ethylhexyl) phosphate	—		—	—	150	
3	磷酸三(2-乙基己酯)	tris (2-ethylhexyl) phosphate	triethex phosphate	$O=P[OCH_2\underset{C_2H_5}{\underset{\mid}{C}}H(CH_2)_3CH_3]_3$	C	20	150	
4	磷酸三丁氧基乙酯	tributoxyethyl phosphate		$O=P(OCH_2CH_2OC_4H_9)_3$	M	20	125	
5	磷酸三(四氢糠酯)	tri (tetrahydrofurfuryl) phosphate			A	—	125	
6	磷酸四氢呋喃酯	tetrahydrofuryl phosphate	—	—	M		125	
7	氯化磷酸二烷基酯	chlorinated dialkyl phosphate	Cetamoll Q	—		20	80	
8	磷酸三(2-氯乙酯)	tri-(2-chloroethyl) phosphate	Flexol	$(CH_2ClCH_2O)_3P\rightarrow O$	—	-	--	
9	磷酸三苯酯	tri-phenyl phosphate	—		C	50	100	低沸点芳烃、含氧化合物

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
10	磷酸三甲苯酯(邻、间、对位的混合体)	tricresyl phosphate, trifolyl phosphate	TCP	$(CH_3C_6H_4O)_3P{-}O$	A,D,M	20	125	SO_2、H_2S气体、芳烃、$C_1\sim C_7$硫醇、硫化合物、杂环化合物、醇、醛、酮、卤化合物、酚
	磷酸三邻甲苯酯	triorthocresyl phosphate	—		B,C,E,Ee(无水)	20	125	
	磷酸三间甲苯酯	trimetacresyl phosphate			—	—	—	
	磷酸三对甲苯酯	triparacresyl phos phate	—		—	—	—	
11	磷酸甲苯二苯酯	cresyl diphenyl phosphate	—	$(C_6H_5O)_2\overset{O}{\overset{\Vert}{P}}OC_6H_4CH_3$		—	150	
12	磷酸三(二甲苯)酯(混合体)	trixylol phosphate		$[(CH_3)_2C_6H_3O]_3PO$	A,M	20	190	低沸点芳烃、杂环化合物
13	磷酸三(2,4二甲苯酯)	tri(2,4-xylenyl)phosphate	TXP		A,C,D	—	140	酚
14	八-2,4-二甲苯季戊四醇四磷酸酯	octa-2,4-xylenyl pentaerythritol tetrakisphosphate	—		二甲苯	·	175	
15	磷酸三-α-萘酯	tri-α-naphthyl phosphate	—		B,E		140	
16	磷酸三-β-萘酯	tri-β-naphthyl phosphate			B,E(热)	—		

续表

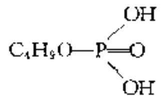
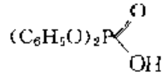
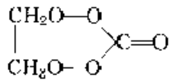
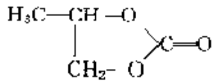
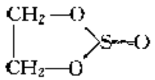
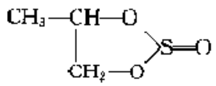
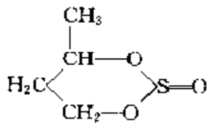
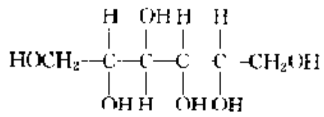
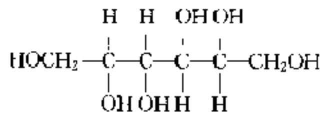
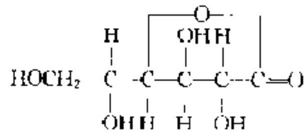
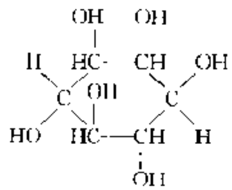
序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/°C		应用范围
						最低	最高	
17	磷酸二氢丁酯	butyl biphosphate	—		—	—	曾使用 100	
18	磷酸氢二苯酯	diphenyl acid phosphate	—		—		曾使用 100	
19	碳酸乙烯酯	ethylene carbonate	—		Ee	—	50	醇、酮、酯
20	碳酸丙烯酯	propylene carbonate	—		D,Ee	10	70	C_4 烃
21	聚碳酸酯树脂	polycarbonate resin	Lexan		C	—	250	
22	硫酸二甲酯	dimethyl sulfate		$(CH_3O)_2SO_4$	E,Ee	—	—	
23	乙二醇亚硫酸酯	ethylene glycol sulfite			—	—	—	
24	1,2 丙二醇亚硫酸酯	1,2-propylene glycol sulfite	—		—	—	—	
25	1,3-丁二醇亚硫酸酯	1,3-butylene glycol sulfite	—		—	—	—	
26	丁二醇硼酸酯	butanediol borate	—	C_4H_8OOBOH	M	-	200	

表 5-32 醇和糖类化合物及其衍生物类固定液

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
1	十一(烷)醇	undecanol		$C_{11}H_{23}OH$	C,M		60	低沸点含氧化合物、胺
2	仲十二(烷)醇	sec dodecanol			M	-	—	低沸点含氧化合物、胺
3	正十六(烷)醇	*n*-hexadecanol	*n* cetyl alcohol	n-$C_{16}H_{33}OH$	M	20	60	低沸点含氧化合物、胺
4	正十八(烷)醇	*n*-octadecanol	stearyl alcohol	n-$C_{18}H_{37}OH$	M		70	低沸点含氧化合物、胺
5	乙二醇	ethylene glycol		$HOCH_2CH_2OH$	C	—	50	低沸点含氧化合物、胺、氮或氧杂环化合物
6	1,2-丙二醇	1,2-propylene glycol		$HO-CH_2-CH(OH)-CH_3$	C	—	—	低沸点含氧化合物、胺、氮或氧杂环化合物
7	9-十八烯-1,12-二醇	9 octadecene 1,12 diol		$CH_2(CH_2)_7CH\ CHCH_2CH(CH_2)_5CH_3$ (OH on the first CH_2 and on CH)	M		200	低沸点含氧化合物、胺、氮或氧杂环化合物
8	双甘油	diglycerol	DG	$(CH_2OHCHOCH_2)_2O$		20	130	
9	卡必醇	Carbitol		$HO(CH_2)_2O(CH_2)_2OC_2H_5$	A,C	—	40	气体烃
10	二甘醇	diethylene glycol	DEG	$(CH_2CH_2OH)_2O$	E	—	110	
11	甘油	glycerol	glycerine	$CH_2(OH)-CH(OH)-CH_2(OH)$	M,E(无水)	20	75	低沸点含氧化合物、氮或氧杂环化合物、甲基吡啶
12	1,2,3,4-丁四醇	1,2,3,4-butanetetraol	ierythritol	$CH_2(OH)\ CH(OH)\ CH(OH)\ CH_2(OH)$	氯仿+丁醇(1+1)	120	150	低沸点含氧化合物、胺
13	季戊四醇	pentaerythritol		$C(CH_2OH)_4$	氯仿+丁醇(1+1)	—	150	低沸点含氧化合物、胺
14	己六醇	dulcitol	galactitol 卫矛醇,甜醇	$HOCH_2-C(H)(OH)-C(OH)(H)-C(OH)(H)-C(H)(OH)-CH_2OH$	E,M·W	—	200	低沸点含氧化合物、胺

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
15	D-山梨糖醇	D-sorbitol			M	100	150	低沸点含氧化合物、胺
16	山梨糖醇	sorbitol		$HOCH_2(CHOH)_4CH_2OH$	M	15	150	甲醇
17	D-甘露醇	D mannitol			M—W	170	200	
18	半乳糖酸γ内酯	D-galactonic acid γ-lactone	—		—	112	150	
19	三缩二乙二醇	triethylene glycol		$HOCH_2(CH_2OCH_2)_2CH_2OH$	A,M		100	
20	三缩四乙二醇	tetraethylene glycol	—	$HOCH_2(CH_2OCH_2)_3CH_2OH$	A		70	
21	环己六醇	inositol(cyclohexanhexaol)	肌醇			225	230	

续表

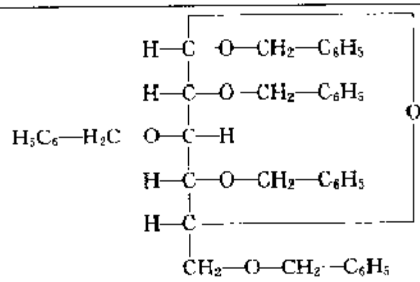
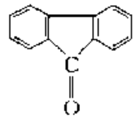
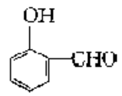
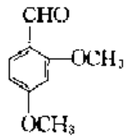
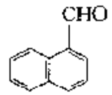
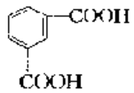
序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
22	五苄基-α-葡萄糖	pentabenzyl-α-glucose	—		—	—	20	芳烃、酚类
23	八(2-羟基丙基)蔗糖	octakis(2-hyd-roxypropyl) sucrose	Hyprose SP-80	$C_{12}H_{14}O_{11}(-CH_2CH(OH)CH_3)_8$	C(热), M	20	200	
24	苄基阿戊糖苷	benzylarabino side	—	$C_6H_5CH_2[OCH_2(CHOH)_3CHO]$	—	—	—	含氧化合物
25	甲基化淀粉	methylated starch	—	—	—	—	200	烃类
26	羟乙基化纤维素	hydroxyethyl cellulose	—		—	—	170	含氧化合物
27	苯甲醇	benzylalcohol	—	$C_6H_5CH_2OH$	Ee	—	30	

表 5-33　醛、酮、酸、酚类化合物类固定液

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
1	丙酮基丙酮	acetonyl acetone	2,5-己二酮	$CH_3-C(=O)-CH_2-CH_2-C(=O)-CH_3$	A,D,Ee	−10	20	气体烃
2	二苯酮	benzophenone		$C_6H_5COC_6H_5$	C	—	60	
3	芴酮	fluoren-9-one			丙酮	—	—	二元酸甲酯
4	水杨醛	salicylic aldehyde			—	—	—	
5	2,4-二甲氧基苯甲醛	2,4-dimethoxybenzaldehyde			—	—	—	醇、酮、酯
6	α-萘醛	α-naphthaldehyde			—	—	曾使用温度 50	芳烃
7	硬脂酸	stearic acid		$CH_3-(CH_2)_{16}\cdot COOH$	A,T	—	100	
8	二十二烷酸	behenic acid	山俞酸	$CH_3-(CH_2)_{20}-COOH$	—	—	150	脂肪酸
9	二甘醇酸	diglycollic acid		$O(CH_2COOH)_2$	—	—	150	
10	间苯二酸	m-phthalic acid	异酞酸		M	—	50	气体烃
11	环己酮	cyclohexanone		$CH_2(CH_2)_4CO$ (ring)	Ee	—	30	

续表

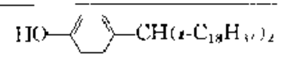
序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
12	二元酸	dimer acid (Neut. eq. 287～299)	Empol 1018	80%C_{36}二元酸+17%C_{54}三元酸+痕量C_{18}一元酸	A,C	30	100	脂肪酸
		dimer acid (Neut. eq. 283～289)	Empol 1014		C	30	100	
		dimer acid (Neut. eq. 285～297)	Empol 1022		C	30	100	
13	三元酸	trimer acid	Emery 3162(美国Emery Industries)	90%C_{54}三元酸+10%C_{36}二元酸	M	60	200	二甲苯、二甲酚
14	褐煤蜡	montan wax		主要成分为褐煤酸(montanic acid)$C_{27}H_{55}COOH$和另一酸$C_{31}H_{63}COOH$	C		—	
15	二异十八烷基对甲酚	di-isooctadecyl *p* cresol	DOPC		—	·		

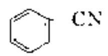
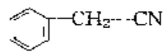
表5-34 有机酸盐类固定液

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
1	己酸Ni Ⅱ盐等	caproates of Ni Ⅱ etc.	—			—	—	
2	油酸Ni Ⅱ盐等	oleates of Ni Ⅱ etc.	—	$(C_{17}H_{33}COO)_2Me$	—		—	胺、吡啶
3	硬脂酸Mn Ⅱ、Co Ⅱ、Ni Ⅱ、Cu Ⅱ、Zn Ⅱ盐	stearates of Mn Ⅱ, Co Ⅱ, Ni Ⅱ, Cu Ⅱ, Zn Ⅱ	—	$(C_{17}H_{35}COO)_2Me$ Me系左列金属之	B,C T	50(Zn盐)	150(Zn盐) 160(Cu盐熔融状态)	酮、醛

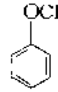
续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
4	硬脂酸汞	mercuric stearate	—	$(C_{17}H_{35}COO)_2Hg$	溶解性差	110	150	酮、醛
5	硬脂酸钾	potassium stearate	—	$C_{17}H_{35}COOK$	E,T 醇		300	硝基乙苯
6	磺基丁二酸二辛酯钠盐	sodium dioctyl sulfosuccinate	Aerosol OT	$CH(SO_3Na)COOC_8H_{17}$ | $CH_2COOC_8H_{17}$				
7	十二烷基苯磺酸钠	sodium dodecyl benzene sulfonate	Siponate DS-10	$C_{12}H_{25}C_6H_4SO_3Na$(含有20%烷基苯磺酸盐和无机盐)	A,C,M	20	200	酚
8	十二烷基醇磺酸盐与烷基、芳基磺酸盐混合物(洗涤剂)	mixture of sulphonated lauryl alcohol and alkylaryl sulphonate	Tide	$CH_3(CH_2)_{10}CH_2OSO_3Na$ 和 $R-C_6H_4-SO_3Na$ ($R=C_8-C_{18}$)	W	—	200	酚、芳胺
9	苯磺酸钠乳化剂(侧链烷基链长约为C_{18})	sodium benzene sulfonate emulsifying agent, with alkyl side chain of ~C_{18}	Oronite		A,T	—	200	
10	硫酸钠与十二烷基苯磺酸钠的干燥的喷射混合物	Spray dry mixture of sodium sulfate and sodium dodecyl benzene sulfonate	Gardilene 40-SD		—	—	—	

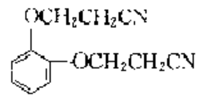
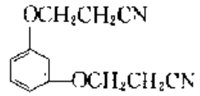
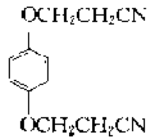
表 5 35　腈及腈醚类化合物类固定液

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
1	羟丙腈	oxypropionitrile	OPN	$HOCH_2CH_2CN$	A		100	低沸点烃
2	ββ'-氧二丙腈	ββ'-oxydipropionitrile	ODPN	$(CNCH_2CH_2)_2O$	A,C,D,M	0	10	卤代烷烃,低沸点烃、醇,胺
3	ββ'-硫二丙腈	ββ'-thiodipropionitrile		$(CNCH_2CH_2)_2S$	A,C,M	25	85	含硫化合物、卤代烷烃
4	ββ'-亚氨基二丙腈	ββ' iminodipropionitrile		$CH_2—CH_2—CN$ HN $CH_2—CH_2$ CN	M	20	70	硫醇、噻吩、硫醚
5	氰基苯	Cyanobenzene	Phenyl cyanide		Ee			
6	苯乙腈	Phenyl acetonitrile	benzyl cyanide		A,C,D	−20	35	气体烃
7	1,2 双(2氰乙氧基)乙烷	1, 2 bis-(2-Cyanoethoxy)ethane	Fractonitrile, ethylene glycol bis(β-cyanoethyl ether)	$CNCH_2CH_2OCH_2CH_2OCH_2CH_2CN$	M		80	卤代烷烃、硫醇、噻吩
8	1,2,3-三(2-氰乙氧基)丙烷	1,2,3-tris-(2-cyanoethoxy)propane	TCEP, Fractonitril Ⅲ	$CH_2—O—CH_2—CH_2—CN$ CH　O　$CH_2—CH_2—CN$ $CH_2—O—CH_2—CH_2—CN$	C,M	20	180	芳烃、芳烃与醇、正十二烷与芳烃、烷基铅、烯烃、环已烷与苯
9	2-甲基 2-丙基-1,3-二(氰乙氧基)丙烷	2-methyl 2-propyl-1,3 di(cyanoethoxy)propane		$H_2C—O—CH_2·CH_2—CN$ H_3C　C　C_3H_7 $H_2C—O—CH_2—CH_2$　CN	—		180	
10	1,2,4-三(2-氰乙氧基)丁烷	1,2,4 tris (2 cyanoethoxy)butane		$CH_2—O—CH_2$　$CH_2—CN$ $CH—O—CH_2—CH_2—CN$ CH_2 $CH_2—O—CH_2CH_2$　CN		—	—	含硫化合物

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
11	1,2,3,4-四(2-氰乙氧基)丁烷	1,2,3,4-tetrakis-(2-cyanoethoxy) butane	Cyano-B	$CH_2OCH_2CH_2CN$ $(CHOCH_2CH_2CN)_2$ $CH_2OCH_2CH_2CN$	A,C.	110	200	含硫化合物
12	1,2,6-三(2氰乙氧基)己烷	1,2,6 Tris(2-cyanoethoxy)hexane		$CH_2—O—CH_2—CH_2\ CN$ $CH\ \ O\ \ CH_2CH_2—CN$ $(CH_2)_3$ $CH_2—O—CH_2\ \ CH_2—CN$	—	—	190	
13	二甘油四β氰乙基醚	diglyceryl tetrakis β-cyanoethyl ether		$\left[\begin{array}{l}OCH_2CH_2CN \\ CH_2CH—CH_2— \\ \quad OCH_2CH_2CN\end{array}\right]_2 O$	—	—	180	硫化合物
14	四(2-氰乙氧基甲基)甲烷或季戊四醇四β-氰乙基醚	tetrakis-(2-cyanoethoxy methyl) methane or, tetra-β-cyanoethyl ether of pentaerythritol	TCEMM, Tetra-N, TCEPE	$C(CH_2OCH_2CH_2CN)_4$	A,C,T	30	195	酯、硫化合物
15	1,2,3,4,5,6-六(2氰乙氧基)己烷	1,2,3,4,5,6-hexakis-(2-cyanoethoxy) hexane	HCEH, Fractonitril Ⅵ	$CH_2OCH_2CH_2CN$ $(CHOCH_2CH_2CN)_4$ $CH_2OCH_2CH_2CN$		·	<240	多元醇
16	1,2,3,4,5,6-六(2-氰乙氧基)环己烷	1,2,3,4,5,6-hexakis (2-cyanoethoxy) cyclohexane	Cycol-N, HCECH	$C_6H_6(OCH_2CH_2CN)_6$	C,T	125	200	硫醇、硫醚、噻吩
17	2氰乙氧基苯	2-cyanoethoxy benzene		OCH_2CH_2CN 	—	—	—	硫醇、硫醚、噻吩

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
18	二(2-氰乙氧基)苯	1,2 bis (2-cyanoethoxy)benzene	BCEB-1,2			125	160	硫醇、硫醚、噻吩
		1,3-bis (2 cyanoethoxy)benzene	BCEB-1,3		—	115	155	
		1,4-bis(2-cyanoetohxy)benzene	BCEB 1,4		—	145	165	
19	戊二腈	glutaronitrile	GN	$NC—CH_2CH_2CH_2\ CN$	M	20	40	
20	己二腈	adipic dinitrile	—	$NC—CH_2CH_2CH_2CH_2—CN$	C	—	50	C_4 烃
21	脂肪腈	aliphatic nitrile	Arneel SD		M,T	30	100	
22	蒸馏过的油腈	oleyol nitrile distilled	Arneel OD		M	—	100	
23	苯二甲腈	phthalonitrile	—	$C_6H_4(CN)_2$	A	—	150	
24	三(2-氰基乙基)硝基甲烷	tris(cyanoethyl)nitromethane		$(NC—CH_2—CH_2)_3C—NO_2$		—	—	
25	甲基二(氰基乙基)硝基甲烷或1,5二氰基-3甲基-3-硝基戊烷	methyl dicyanoethyl nitromethane or, 1, 5-dicyano 3 methyl-3nitropentane	-	$NC—CH_2—CH_2—C(CH_3)(NO_2)—CH_2—CH_2—CN$	—	—	150	
26	氰乙酸乙酯	ethyl cyanoacetate	—	$CNCH_2COOC_2H_5$	—		—	
27	氰乙基蔗糖	Cyanoethyl sucrose			C	20	200	

续表

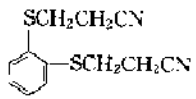
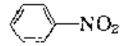
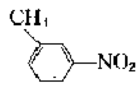
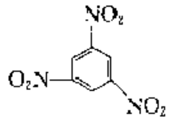
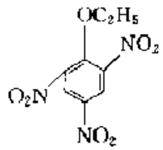
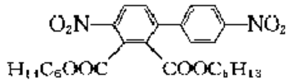
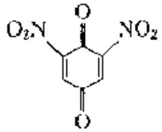
序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/°C		应用范围
						最低	最高	
28	*N*,*N*,*N*′,*N*′四(2-氰乙氧基丙基)乙二胺	*N*,*N*,*N*′,*N*′ tetrakis (2-cyanoethoxypropyl) ethylene diamine	*N*,*N*,*N*′,*N*′-tetrakis-(2-cyanoethoxy)quadrol, TCEQ	$(CH_3CHCH_2)_2NCH_2CH_2N(CH_2CHCH_3)_2$，其中 CH 上分别连 OCH_2CH_2CN	—	—	—	
29	氰乙基甲酰胺	cyanoethyl formamide		$HCONHCH_2CH_2CN$	—	—	125	
30	*N*,*N*-二(2-氰乙基)甲酰胺	*N*,*N*-bis (2 cyanoethyl)formamide	BCEF	$HC(=O)—N(CH_2CH_2CN)_2$	M,C	20	125	
31	癸二腈	sebaconitrile		$CN(CH_2)_8CN$	T	0	75	C_4烃
32	1,2-双(氰乙氧基)丙烷	1,2-Bis (2-cyanoethyloxy)propane	-	$CNCH_2CH_2O—CH_2—CH_2—CH_2—OCH_2CH_2CN$（按原图：$CNCH_2CH_2O-CH_2$ / CH_2 / $CNCH_2CH_2O-CH_2$）	A	—	90	
33	*N*-(甲酰基,甲基)-β-氨基丙腈	*N*-(formyl,methyl) β-aminopropionitrile		$HC(=O)(H_3C)N—CH_2CH_2—CN$	—	—	—	
34	*N*(乙酰基、甲基)β-氨基丙腈	*N*-(acetyl,methyl)-β-aminopropionitrile	—	$CH_3O(CH_3)N—CH_2CH_2—CN$	—	·	—	
35	邻二(2-氰乙硫基)苯	*O*-di-(2-cyanoethylthio)benzene			—	—	110	氮杂环化合物
36	聚甘油氰乙醚	Polyglycerin cyanoethyl ether	Cyanoethylated polyglycerine (氰乙基化聚甘油)	-	C	—	200	同碳数的醇

表 5 36　硝基化合物类固定液

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/°C		应用范围
						最低	最高	
1	硝基苯	nitrobenzene	—		B,Ee	6	20	氯硅烷
2	间硝基甲苯	*m*-nitrotoluene	—		—	17	30	
3	1,3,5-三硝基苯	1,3,5-trinitrobenzene	—		Ee	—	—	烯烃、芳烃
4	2,4,6-三硝基苯乙醚	2,4,6-trinitrophenetole						芳烃
5	二硝基联苯	dinitrobiphenyl	—	$C_{12}H_8(NO_2)_2$	—	—	<200	
6	1,6-二硝基联苯-2,3-二羧酸己酯	1,6-dinitrodiphenyl-2,3-dicarboxylic acid hexyl ester	—		—	—	140	
7	α-硝基萘	α-nitronaphthalene	—	$C_{10}H_7NO_2$	A	—	100	低沸点烃、芳烃
8	2,6-二硝基苯醌	2,6-dinitrobenzequinone	—		—	—	—	低沸点烃、芳烃

续表

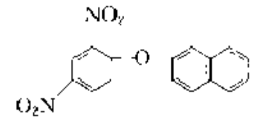
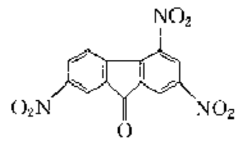
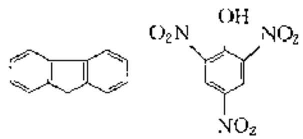
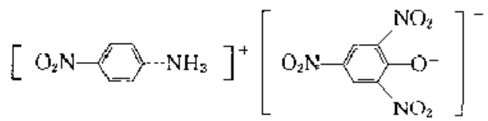
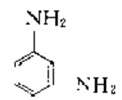
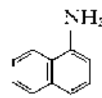
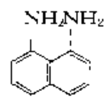
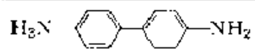
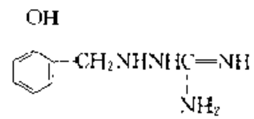
序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
9	2,4-二硝基苯-2-萘醚	2,4-dinitrophenyl-2-naphthyl ether	—		—	—	—	
10	2,4,7-三硝基-9-芴酮	2,4,7-trinitro-9-fluorenone	-		A,C	—	180(260分解)	芳烃、环烷
11	芴-苦味酸(1+1)	fluorene picric acid (1+1)	—		C	50	100(130℃分解)	芳烃
12	乙二醇3,5-二硝基苯甲酸酯	ethylene glycol 3,5-dinitrobenzoate		—	—	—		烯烃、芳烃
13	四硝基联苯酸-二-ω氢-八氟戊酯	di-ωH-octafluoropentyl ester of tetranitrodiphenic acid	—	$(C_6H_2)_2(NO_2)_4[COO(CF_2)_4CH_3]_2$	—	-	—	
14	对硝基苯胺苦味酸盐	*p*-nitroaniline picrate	—		—	—	110	

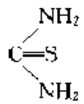
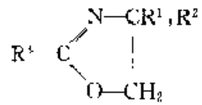
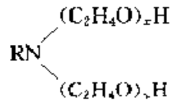
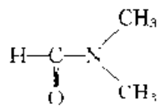
表 S 37 胺、酰胺及聚酰胺类固定液

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃ 最低	使用温度/℃ 最高	应用范围
1	脂肪族伯胺	$C_{12}\sim C_{18}$ primary aliphatic amines	Armeen SD	$CH_3-(CH_2)_{11}-CH_2-NH_2$ (20%) $CH_3-(CH_2)_{16}-CH_2-NH_2$ (17%) $CH_3-(CH_2)_7-CH=CH-(CH_2)-CH_2-NH_2$ (26%) $CH_3-(CH_2)-CH=CH-CH_2-CH=CH$ (37%) $H_2N-H_2C-(H_2C)_5$	A,C,D,T	20	100	醇、二醇、硝基化合物、吡啶、胺、喹啉、硫醇
2	脂肪族仲胺	Secondary aliphatic amine	Armeen 2 S	分子量 508	A,M,T	30	125	醇、二醇、硝基化合物、吡啶、胺、喹啉、硫醇
3	大豆胺	Soya amine	Armeen S	85%为伯胺				
4	二氢化牛脂胺	dihydrogenated tallow amine	Armeen 2 HT	85%为伯胺	C	—	100	
5	二癸胺	didecylamine		$(C_{10}H_{21})_2NH$	C	—		醇、胺
6	四乙烯五胺	tetraethylene pentamine	TEP,三缩四个乙二胺	$H_2N(CH_2CH_2NH)_3CH_2CH_2NH_2$	M	20	150	甲胺、喹啉、醇、硫醇
7	二乙醇胺	diethanolamine		$HN(C_2H_4OH)_2$	A,E,M	—	60	甲胺、喹啉、醇、硫醇
8	三乙醇胺	triethanolamine	TEA	$N(CH_2CH_2OH)_3$	A,C,E,M	20	75	肼化合物、胺
9	苯基二乙醇胺	phenyl diethanolamine	PDEA	$C_6H_5N(CH_2CH_2OH)_2$	A	60	150	
10	N,N,N',N'-四(2-羟乙基)乙二胺	N,N,N',N'-tetrakis (2-hydroxyethyl) ethylene diamine	THEED	$(HOCH_2CH_2)_2NCH_2CH_2N(CH_2CH_2OH)_2$	A,C,E,T	20	135	胺、多元醇、含氧溶剂、精油
11	N,N,N',N'-(2-羟乙基)(三(2-羟丙基)乙二胺	N,N,N',N' mono (2-hydroxyethyl) tri (2-hydroxypropyl) ethylene diamine	—	$(CH_3CH(OH)CH_2)_2NCH_2CH_2N(CH_2CH_2OH)(CH_2-CH(OH)-CH_3)$	—		130	胺、醇

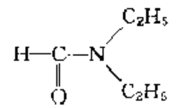
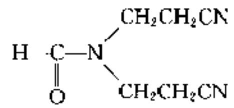
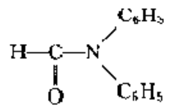
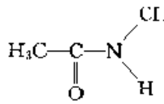
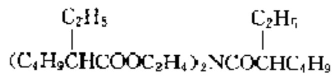
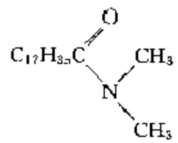
续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
12	*N*,*N*,*N'*,*N'*-四(2-羟丙基)乙二胺	*N*,*N*,*N'*,*N'* tetrakis(2-hydroxypropyl) ethylene diamine	Quadrol (Wyandotte Chemical Corp)	$(CH_3CH(OH)CH_2)_2NCH_2CH_2N(CH_2CH(OH)CH_3)_2$	A,C,D,M	0	150	胺、醇
13	四羟基乙烯二胺	tetrahydroxyethylene diamine	THED	$(HO)_2NCH_2CH_2N(OH)_2$	C	20	120	胺、含氧溶剂
14	硬脂酰基二乙烯三胺	stearyl diethylene triamine	striam	$C_{17}H_{35}CONHCH_2CH_2NHCH_2CH_2NH_2$	-	—	—	氮化合物
15	间苯二胺	*m*-phenylene diamine			A,C	—	75	
16	二苯胺	diphenyl amine	—	$(C_6H_5)_2NH$	E,二硫化碳	54	85	硫醇、硫醚
17	α-萘胺	α-naphthyl amine			A	50	85	环烷、低沸点芳烃
18	1,8-二氨基萘	1,8-diaminonaphthalene	-		—		85	
19	苯基萘基胺	Phenyl naphthyl amine	—	$C_6H_5NHC_{10}H_7$	—		—	含氧化合物
20	联苯胺	benzidine	—		Ee		—	低沸点芳烃、C_1~C_6 醇
21	水杨氨基胍	Salicylamino guanidine	-		—	--	170	

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/°C 最低	使用温度/°C 最高	应用范围
22	乙二醇胺	Polyethylene glycol amine	Polyglycol amine H163	—		40	210	胺
23	聚乙烯亚胺	Polyethylene imine	PEI-1000	$H_2N[CH_2CH_2NH]_nH$	M	0	250	烷基吡咯、吡啶
			PEI-18		A,M	0	200	
			PEI 6		M	0	175	
24	聚丙烯亚胺	Polypropylene imine		—	C	0	200	
25	硫脲	thiourea	—		—		—	氯化合物
26	胺型油溶性表面活性剂	amine surfactant	Alkaterge T	 $R^1,R^2=CH_3、C_2H_5$ 或 CH_2OH R^3=长碳氢链	C,D	·	75	
			Alkaterge C			—	—	
27	大豆脂肪胺与环氧乙烷缩合物	fatty amines derived from soy beans condensed with ethylene oxide	Ethomeen S/25	 R-从大豆胺得来，$x-y=15$	C	—	75	
28	甲酰胺	formamide	—	$HCONH_2$	M	3	20	
29	二甲基甲酰胺	*N*,*N*-dimethyl formamide	DMF		A,C,D,M	—	20	C_1～C_4 气体烃

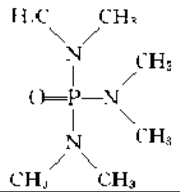
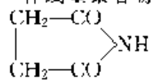
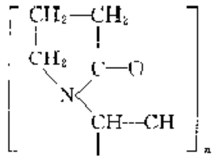
续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
30	二乙基甲酰胺	*N*, *N*-diethyl formamide	—		—	—	25	
31	*N*, *N*-二(2-氰基乙基)甲酰胺	*N*, *N*-dicyanoethyl formamide	—		--	—	125	
32	二苯基甲酰胺	*N*, *N*-diphenyl formamide	DPF		M	—	100	低沸点烃
33	*N*-甲基乙酰胺	*N*-methylacetamide	—		—	—	60	
34	*N*, *N* 二(2-乙基己酸乙酯)替-2乙基己酸酰胺	*N*, *N* di (2-ethyl caproyloxy-ethyl)-2-ethyl caproamide	Flexol 8N8		C, D	20	190	液体烃、醇、酮、酯
35	*N*, *N*-二甲基硬脂酸酰胺	*N*, *N*-dimethyl-stearamide	Hallcomid M18		A, M	40	150	含氧化合物、低沸点烃
36	*N*, *N*-二甲基硬脂酸酰胺[混以肉豆蔻酸和棕榈酸酰胺]	*N*, *N*-dimethyl-stearamide (mixed with some myristic and palmitic acid amides)	Hallcomid M 18 OL (Hallcomid M18 OL 亦为一种硬脂酸酰胺)	-	A, C, D, M	30	150	含氧化合物

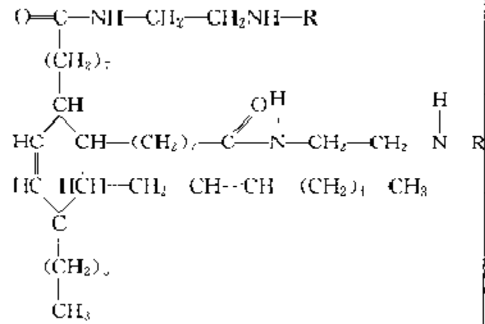
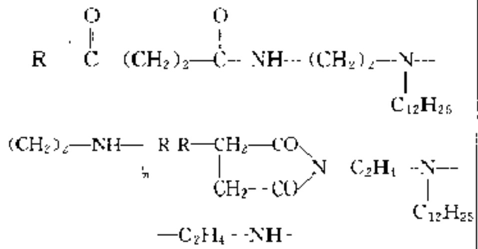
续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
37	*N*,*N*-二乙基硬脂酸酰胺	stearic acid diethylamide	—	$C_{17}H_{35}-C(=O)-N(C_2H_5)_2$	--			
38	*N*,*N*-二乙基棕榈酸酰胺	Palmitic acid diethylamides	—	$C_{15}H_{31}-C(=O)-N(C_2H_5)_2$		—	—	
39	*N*,*N*-二甲基油酰胺	*N*,*N*-dimethyloleylamide	—	$CH_3-(CH_2)_7-CH=CH-(CH_2)_7-C(=O)-N(CH_3)_2$	M		150	含氧化合物
40	*N*,*N*,*N'*,*N'*-四乙基己二酰胺	adipic acid tetraethylamides		$(H_5C_2)_2N-C(=O)-(CH_2)_4-C(=O)-N(C_2H_5)_2$	—	—	—	芳烃
41	*N*,*N*,*N'*,*N'*-四乙基壬二酰胺	azelanic acid tetraethylamides		$(H_5C_2)_2N-C(=O)-(CH_2)_7-C(=O)-N(C_2H_5)_2$	—	—	—	芳烃
42	*N*,*N*,*N'*,*N'*-四乙基癸二酰胺	Sebacic acid tetraethylamides	—	$(H_5C_2)_2N-C(=O)-(CH_2)_8-C(=O)-N(C_2H_5)_2$				芳烃
43	二乙基氨腈	diethyl cyanamide	*N*,*N*-二乙基氰酰胺	$(C_2H_5)_2N\cdot CN$	—	-		
44	二丁基氨腈	dibutyl cyanamide	*N*,*N*-二丁基氰酰胺	$(C_4H_9)_2N\cdot CN$	—			

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
45	六甲基磷酰三胺	hexamethyl phosphoramide	HMPA		A,M	10	50	气体烃
46	聚4-十二烷基二乙烯三胺丁二酰胺	Poly 4 dodecyldiethylene triamine succinamide	DDTS	一种线型聚合物,其端基为 	A,C,D			氮化合物
47	聚N-乙烯基吡咯烷酮	Poly*N*-Vinylpyrrolidone	K 90 PVP		M	—	220	
48	邻苯二甲酸和己二胺-1,6聚酰胺	Polyamide of phthalic acid and hexamethylene-1,6-diamine			—	—	—	
49	聚亚酰胺	Polyimide	Poly I 100,110 PZ 109		C	90	275	甾族化合物
50	聚酰胺	Polyamide liquid phase monomers (molar ratio)-C_{36} dibasic acid;1,3 di 4-piperidyl propane : 4-(3-phenylpropyl) piperidine = 1.00 : 0.90 : 0.20	PZ-103 Poly-A103	单体摩尔比:C_{36}二元酸;1,3- -4-哌啶基丙烷;4-(3-苯基丙基)哌啶=1.00 : 0.90 : 0.20	C	70	300	C_{10}～C_{34}烷、芳烃、单糖衍生物、甾族化合物、氨基酸衍生物
		Same monomers (molar ratio) 1.00 : 0.75 : 0.50	PZ-101A Poly A101A Poly A135	同上单体摩尔比=1.00 : 0.75 : 0.50	C	70	>275	

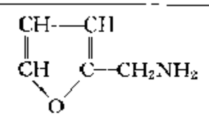
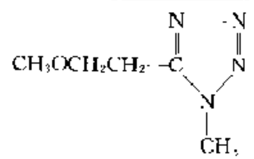
续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
51	聚酰胺树脂	a polyamide resin (dimer of linolic acid copolymerized with ethylene diamine)	Versamide 900	 (亚油酸二聚物与乙二胺之共聚物)	C(煮数小时)	190	275	酯、胺、吡啶、氨基醇、硝基苯、除草剂
			Versamide 930		C(煮数小时)	115	150	
			Versamide 940		C(煮数小时)	110	200	
			Versamide 3000		C(煮数小时)	175	450	
52	聚酰胺	linear polymer of 4-dodecyl diethylenetriamine Succinamide	—			—	—	胺、酯
53	酰胺纤维 酰胺 6 纤维 酰胺-66 纤维	Copolymer of hexylmethylene diamine with adipic acid	Nylon 6 Nylon-66	$-[NH(CH_2)_6-NH-\overset{O}{\overset{\Vert}{C}}-(CH_2)_4-\overset{O}{\overset{\Vert}{C}}]_n-$	甲酸		—	芳烃

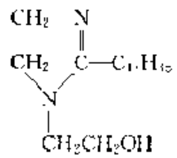
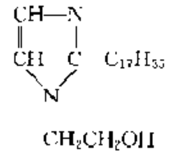
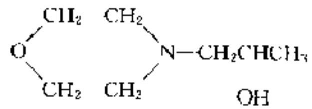
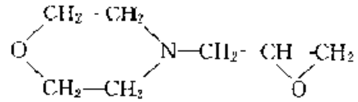
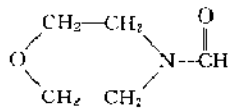
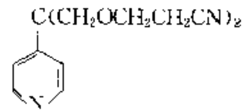
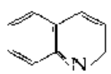
续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
54	聚六亚甲基己二酰胺和己内酰胺的共聚物	Polyhexmethylene adipamide caprolactam copolymer	N-66/6	$-\!\!\left[NH(CH_2)_6-NHC(=O)-(CH_2)_4C(=O)\right]_n-$ (N-66)和 $-\!\!\left[(CH_2)_5CONH\right]_n-$ (N-6)的共聚体,N 66 和 N-6 的质量比为 30 比 70	苄醇		180	苯二甲酸二甲酯
55	四亚乙基戊胺	tetraethylene pentamine	TEPN	$N[C(CH_2)_2NH(CH_2)_2NH_2][C(CH_2)_2NH(CH_2)_2NH_2]$	C	—	125	醇、二醇、胺、吡啶、喹啉、硫醇

表 5-38 氮杂环化合物类固定液

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
1	糠胺	furfuryl amine			—	-	30	气体烃
2	1-甲基-5-(2-甲氧基乙基)四唑	1 methyl-5-(2-methoxyethyl)-tetrazole	-		—	—	80	C_1~C_4 烃
3	苯巯基噻四唑	phenylmercaptothiatetrazole	—		-	—	160	含氧化合物

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/°C		应用范围
						最低	最高	
4	1 羟基-2-十七烷基咪唑啉	1-hydroxy-2-heptadecenyl imidazoline	Amine 220		C、W	20	180	含氧化合物
5	1-羟乙基-2-十七烷基甘噁啉	1 hydroxyethyl-2-heptadecenyl glyoxaline	Amine 220			·	180	
6	N-β-羟基丙基吗啡啉	N β hydroxypropyl morpholine	—		—	—	—	
7	2,3-环氧丙基吗啡啉	2，3 epoxypropyl morpholine	—			–	—	
8	N-甲酰基吗啡啉	N-formyl morpholine	—		—	–	50	
9	三(2-氰乙氧基甲基)-4-皮考啉	tris-(2-cyanoethoxymethyl)-4-picoline	—		—	—	140	氮杂环化合物
10	喹啉	quinoline	—		E、Ee	−15	50	气体烃

续表

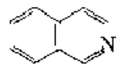
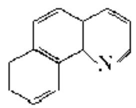
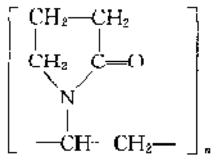
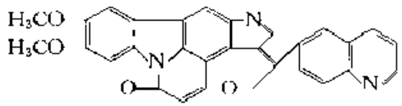
序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
11	异喹啉	isoquinoline			M	—	50	气体烃
12	7,8-苯并喹啉	7,8 benzoquinoline	—		A,C,D	53	150(液晶状态 47～52)	烷基硫化合物、二甲苯
13	聚 *N*-乙烯基吡咯烷酮	poly*N*-vinylpyrrolidone	K90,PVP		M	—	220	
14	番木鳖碱/喹啉	brucine/quinoline	—				25	气体烃
15	羟基聚环氧乙烷吩噻嗪	hydroxypolyoxyethylene phenothiazine	—	—	—	—	150	芳烃、醇、酯
16	2 甲基哌嗪二甲酰胺	2-methyl piperazine diformamide	—	—	—	-	100	低沸点烃

表 5-39　含硫化合物类固定液

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
1	甲硫醚	dimethyl sulfide	—	$H_3C—S—CH_3$	A	—	50	
2	二甲砜	dimethyl sulfone	—	$(H_3C)_2SO_2$	A,B	—	30	气体烃
3	二甲基亚砜	dimethyl sulfoxide	DMSO	$(CH_3)_2SO$	A,BE,Ee	—	30	气体烃
4	亚丁基砜	tetramethylene sulphone	—	$(CH_2)_4SO_2$	—	—	30	

续表

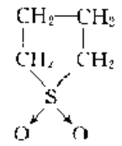
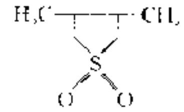
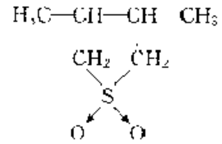
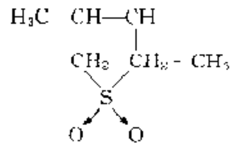
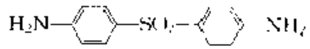
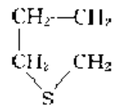
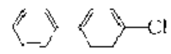
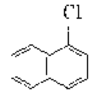
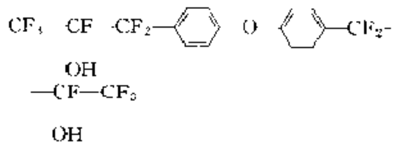
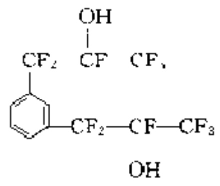
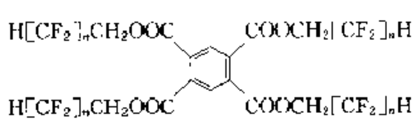
序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
5	二正丙基砜	di n propylsulfone		$(CH_3CH_2CH_2)_2SO_2$	A		60	
6	环丁砜	Sulfolane tetramethylenesulfone	—		A	—	—	
7	二甲基环丁砜	dimethyl sulfolane			A,C,D	20	50	C_1～C_5气体烃
8	3,4-二甲基环丁砜	3,4-dimethyl sulfolane, 3,4 dimethyltetrathiophene S dioxide	Perkin Elmer E		B,C,P	—	35	气体烃
9	2,4 二甲基环丁砜	2,4-dimethyl sulfolane	DMS		B,C,D,M,P	—	50	低沸点烃
10	4,4'-二氨基二苯砜或二(对苯胺)砜	4,4' diaminodiphenyl sulfone	DDS		A,E	·	180	酚
11	四氢噻吩	tetrahydrothiophene	·		A	—	—	
12	聚砜	polysulfone	—		C		>315	

表 5-40　含卤素化合物及其聚合物类固定液

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃ 最低	使用温度/℃ 最高	应用范围
1	氯代十八烷	octadecyl chloride	1-Chlorooctadecane	$C_{17}H_{35}CH_2Cl$	—	—	100	卤代烃
2	对氯代联苯	*p* Chlorobiphenyl			C	—	80	卤代烃
3	α-氯萘	α-Chloronaphthalene			C,M,P	—	75	卤代烃、甲苯
4	氯代乙酸乙酯	ethyl Chloroacetate	—	$Cl—CH_2C(=O)—OC_2H_5$	—		25	甲苯氯硅烷
5	二2氯乙醚	di-2-Chloroethylether		$Cl—CH_2—CH_2—O—CH_2—CH_2—Cl$		--	25	甲基氯硅烷
6	1,1,3-三氯丙烷	1,1,3 trichloro propane	—	$Cl_2CH—CH_2—CH_2—Cl$	—	--	25	甲基氯硅烷
7	氯化石蜡	Chlorinated paraffin wax	Chlorowax 70		C,T	--	130	
8	五氯代联苯	Pentachlorobiphenyl	—			—	--	
9	多氯联苯	Polychlorobiphenyl	Arochlor 1232 Arochlor 1242 Arochlor 1254 Arochlor 1260 Arochlor 1262 Arochlor 5442 Arochlor 5460	一种多氯联苯混合物(数字后两位表示氯的百分数)	A,C,D,M B,糠醛 — --	50 — — 40 -- 50 —	125 360 400 380 200	Cl_2、HCl、HF 等腐蚀性气体、氟化合物、氯化合物
10	4,4′双-(2-羟基六氟-2-丙基)二苯醚	4,4′-bis(2 hydroxy hexafluoro-2-propyl) diphenyl ether	—		A	—	170	

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
11	1,3-二(2-羟基六氟-2-丙基)苯	1,3 di (2 hydroxy hexafluoro-2-propyl) benzene	·		A	—	150	
12	全氟三丁胺	Perfluorotributylamine	MMM FC-43	$(C_4F_9)_3N$	—	·	30	气体氟化物
13	全氟烷油	Perfluoroalkane oil	fluorocarbon oil	$C_{21}F_{44}$	—	·	—	气体氟化物
14	苯均四酸氟代烷基酯	fluoroalkyl ester of pyromellitic acid	Zonyl E-7(美国 du Pont de Nemours)		A	0	200	醇与酮、低沸点芳烃
15	*dl* 樟脑酸氟代烷基酯	fluoroalkl ester of *dl*-capmhoric acid	Zonyl E-91(同上)		—	0	200	醇与酮、低沸点芳烃
16	四氯全氟辛酸乙酯	ethyl ester of tetrachloroperfluoro caprylic acid	ethyl ester of the acid Kel F 8114	$Cl(CF_2—CFCl)_3—CF_2—COOC_2H_5$	A	—	80	卤化磷氮素合物$(PNX_2)_n$
17	卤代烃	halogenated hydrocarbon	Kel F 40	—	—	—	—	烷烃、芳烃
18	卤碳油	halogenated hydrocarbon(halocarboil)	Halocarbon oil 11-14,14-25	—	C	30	100	卤代烃、Cl_2、NO_2、CF_4 等气体
19	卤碳蜡	halocarbon wax	Poly Tergent J-300,J-100	—	A	50	150	卤代烃、Cl_2、NO_2、CF_4 等气体
20	聚三氟氯乙烯油	Polychlorotrifluoroethylene oil	Kel F oil 3 Kel-F oil 10 Voltalef oil	$\{CF_2CFCl\}_n$	— A.C.D —	0 — —	50 100 —	硫氟化合物、氟铀化合物、氯化合物

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
21	聚三氟氯乙烯蜡	Polychorotrifluoroethylene wax	Kel-F wax 210,550	$Cl(CF_2—CFCl)_nCF_3$	C	—	200	硫氟化合物、氟铀化合物、氯化合物
			Fluorolube MO-10		A.C.D	—	200	
22	氯氟碳聚合物（全氟氯代烷）	Chlorofluorocarbon	Fluorolube HG 1200	—	A	50	200	硫氟化合物、氟铀化合物、氯化合物
			Fluorolube 530		A	—	100	
			Fluorolube 2000		—	—	175	
			LR 160		—	—	—	
			Fluorolube GR362 或 FGR		B.D	20	100	
23	氟橡胶	fluorogum	氟橡胶Ⅰ（上海试剂一厂）	偏氟乙烯与三氟氯乙烯的共聚物，以偏氟乙烯为主	A	—	200	卤代烃、无机和有机腐蚀性化合物、卤族化合物
			氟橡胶Ⅱ（上海试剂一厂）	偏氟乙烯与三氟氯乙烯的共聚物以三氟氯乙烯为主	A	—	180	
			氟橡胶Ⅲ（上海试剂一厂）	偏氟乙烯与全氟丙烯的共聚物	A	—	250	
			Viton Ⅰ	偏氟乙烯与全氟丙烯的共聚物	—	—	200	
			Viton Ⅱ	偏氟乙烯与二氟氯乙烯的共聚物			180	
			Viton Ⅲ		—	—	250	
24	乙二醇聚氟烷氧基全卤代苯醚	ethylene glycol polyfluoroalkoxy perhalogeno phenylether	ПФАФЭГ-Ⅲ（前苏联）	$(R_FO)_nC_6X_{5-n}OCH_2CH_2OC_6X_{5-n}(R_FO)_n$ $n=1,2;R_F=OCH_2(CF_2)_mH;$ $m=4,8;X=F,Cl$	—	-	—	
25	四氯全氟辛酸乙酯	tetrachloroperfluorocaprylic acid ethyl ester	—	—	—	—	80	卤化磷、氮聚合物
26	甘油三氯代烯丙基醚	trichloroallyl ether of glycerine	—	$CCl_2=CClCH_2OCH_2\underset{\mid}{C}HCH_2OH$ OH	—	—	—	氯代烃

表 5-41　无机盐类固定液

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃ 最低	使用温度/℃ 最高	应用范围
1	氯化锂	lithium chloride	—	LiCl	溶于 PEG 中，然后涂于载体上	614	650	LiCl 可用于多环芳烃 CsCl 可用于联苯
	氯化铯	cesium chloride	—	CsCl		642	—	
	氯化铷	rubidium chloride	—	RbCl		-	—	
	氯化锶	strontium chloride	—	$SrCl_2$			—	
	氯化镁	magnesium chloride	—	$MgCl_2$			—	
	氯化钙	calcium chloride	—	$CaCl_2$				
	氯化钡	barium chloride	—	$BaCl_2$		-	—	
2	硝酸银	silver nitrate		$AgNO_3$(溶于右列溶剂中，将溶液涂载体上)	乙二醇	—	25	C_2～C 不饱和烃，C.～C_8 环烷
					二乙二醇		30	
					苄基腈	—	65	
					聚乙二醇	—	65	
					水		—	
3	乙二醇硝酸银(2+1)	ethylene glycol-silver nitrate(2+1)	—	$AgNO_3$与 $HOCH_2CH_2OH$ 的质量比为：1：2	—	20	30	C_2～C_7 不饱和烃，C_5～C_8 环烷
4	丙二醇-硝酸银(3+1)	propylene glycol silver nitrate(3+1)	-	$AgNO_3$ 与 $HOCH_2CH_2CH_2OH$ 的质量比为：1：3	M	30	150	-
5	苄基腈硝酸银(2−1)	benzyl cyanide silver nitrate(2+1)	—	$AgNO_3$ 与 $C_6H_5CH_2CN$ 的质量比为：1：2	A	O	25	-
6	过氯酸银	silver perchlorate	—	$AgClO_4$(涂法同 $AgNO_3$)	四氢化萘		--	-
7	硝酸铊	thallium nitrate	—	(涂法同 $AgNO_3$)	二乙二醇	—	60	芳烃、萜烯
					聚乙二醇 400		130	
8	硝酸银络合物	silver complex	--	AgL_2NO_3(L＝吡啶，2-甲基吡啶，3 甲基吡啶或 4 甲基吡啶)	—	—	40	烯烃
9	硅酸镁	magnesium silicate	—	$MgSiO_3$	-		500	

续表

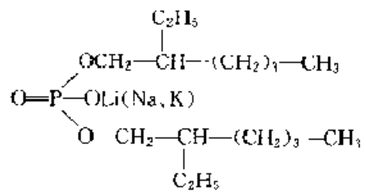
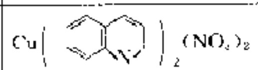
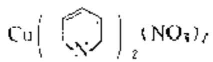
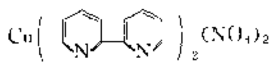
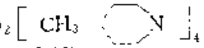
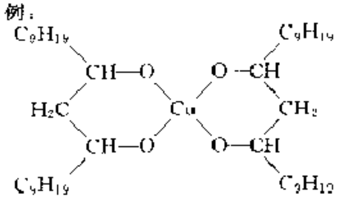
序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
10	硼氟化银	silver borofluoride		$AgBF_4$	—	—		辛烯、己二烯
11	磷酸二(2乙基己酯)锂(钠、钾)	lithium(sodium, Potassium) di (2 ethyl hexyl) phosphate	—		·		180	氯代苯
12	低共熔混合物	eutectic mixtures	—	$NaCl$ 41% + $AlCl_3$ 59%		126	400	多环芳烃、酮、吡啶、吡咯、芳胺、硫化合物
				KCl 33% + $CdCl_2$ 67%		383	500	
				$BiCl_3$ 89% + $PbCl_2$ 11%	w		520	
				$NaNO_3$ 18.2% + KNO_3 54.5% + $LiNO_3$ 27.3%		150	400	
				$InCl_3$ 50% + $TiCl$ 50%	—	262	290	
				KCl 49% + $LiCl$ 51%	—	352	680	
				$InCl_3$ 49% + $NaCl$ 51%	—		—	
				$RbCl$ 40% + $AgCl$ 60%	—	253	680	
				$ZnCl_2$ 52% + $TiCl$ 48%	—	213	365	
				$PbCl_2$ 37% + $FeCl_3$ 63%	—	—	—	
				$BiCl_2$ 48% + $FeCl_3$ 52%		—		
				$TiCl$ 32.5% + $BiCl_3$ 67.5%	—	-	—	
				$NaFeCl_4$	—	158	300	
				$NaAlCl_4$	—	152	450	

表 5-42 过渡金属络合物类固定液

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
1	铜铵络合物	copper-amine complexes				—	105	芳烃、醇、酮、辛烯
			—		—		—	
					—		300	
2	二硫氰基-四-4-甲基吡啶的铁、钴、镍络合物	dithiocyanatotetrakis-(4-methylpyridine) complexes of Fe, Co, Ni		$M(CNS)_2$  M＝Fe、Co或Ni	C	—	80(90℃时迅速分解)	甲苯
3	二硫氰基-四-1-苯乙胺的镍络合物	dithiocyanatotetrakis-(1-phenylethyl amine) complex of Ni		$Ni(NCS)_2(CH_3CHNH_2)_4$（C_6H_5 连于 CH）		—	80(90℃时迅速分解)	
4	正壬基-β-二酮的铍、铝、镍、锌或铜络合物	n-nonyl-β-diketonecomplexes of Be, Al, Ni, Zn, Cu		$M(n\text{-}C_9H_{19}COCH_2CO \cdot n\text{-}C_9H_{19})_X$，M＝Be、Zn、Cu、Ni，X＝2；M＝Al，X＝3 例：	C	—	120(Cu络合物)	醇

续表

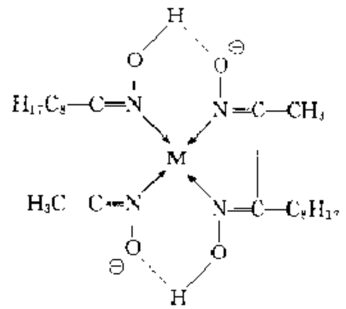
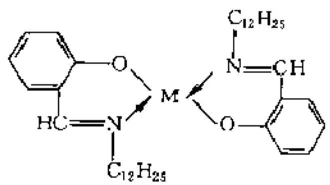
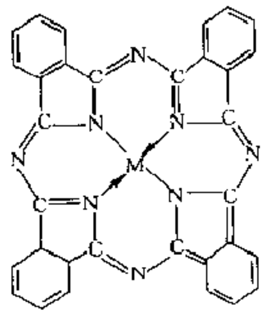
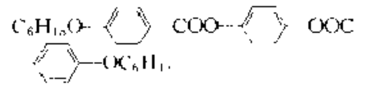
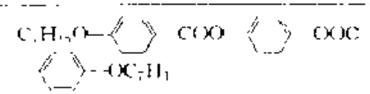
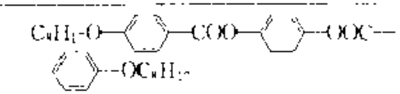
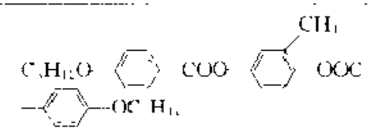
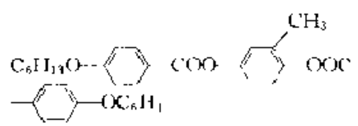
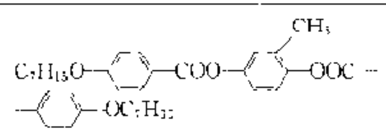
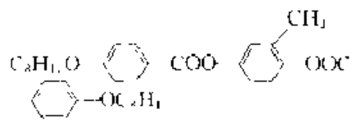
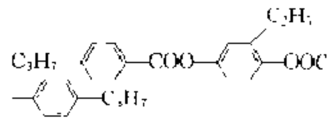
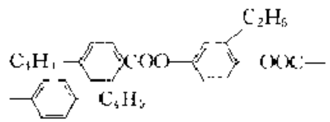
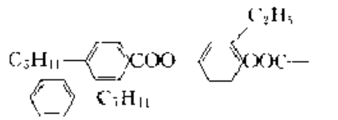
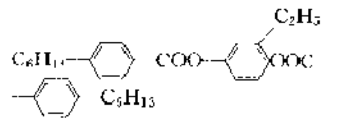
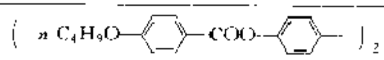
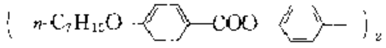
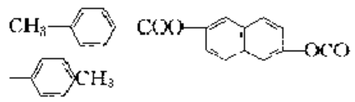
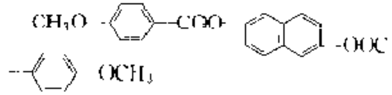
序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
5	甲基-正辛基乙二醛二肟的镍、钯、铂络合物	methyl-*n*-octyl glyoximes of Ni, Pd, Pt	—	 M—Ni, Pd, Pt	—	Ni105 Pd110 Pt120	180 180 190	醇
6	*n* 十二烷基水杨醛亚胺的镍、铂、钯或铜络合物	*n* dodecyl salicylaldimines of Ni, Pd, Pt, Cu	—		— — —	Ni54 Pt116 Pd100 Cu60	180 135 160 180	醇、酮、胺
7	酞花青络合物	phthalocyanine complexes of Fe, Co, Ni, Al, Cu, Zn			—	—	曾使用 302	醇、酮、胺

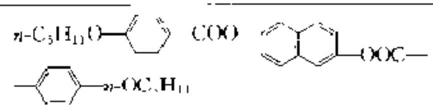
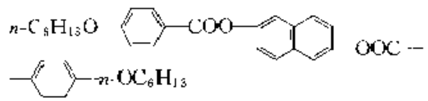
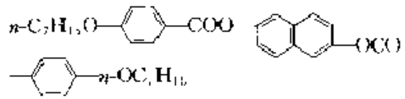
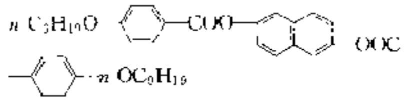
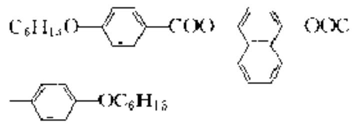
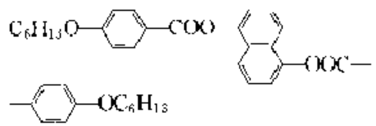
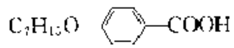
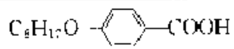
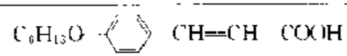
表 5-43 液晶类固定液

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	液晶相温度,℃	应用范围
1	对苯二(对己氧基苯甲酸酯)	*p*-phenylene bis(*p*-hexyloxy benzoate)	PBH$_x$B		—	N 121~213	芘油
2	对苯二(对庚氧基苯甲酸酯	*p*-phenylene bis(*p*-heptoxy benzoate)	PBH$_p$B		A、D	S 83~121	乙苯萘
3	对苯二(对辛氧基苯甲酸酯)	*p*-phenylene bis(*p*-octyloxy benzoate)	PBOB		D	N 72~156	低沸点酚
1	邻甲基对苯二(对戊氧基苯甲酸酯)	*o*-methyl *p*-phenylene bis(*p*-penlyloxy benzoate)	MPBA$_m$B		—	N 121~148.5	
5	邻甲基对苯二(对己氧基苯甲酸酯)	*o*-methyl-*p*-phenylene-bis(*p*-hexyloxy-benzoate)	MPBH$_x$B		—	N 88~172	二甲苯、二乙烯苯
6	邻甲基对苯二(对庚氧基苯甲酸酯)	*o*-methyl *p*-phenylene bis(*p*-heptoxy benzoate)	MPBH$_p$B		·	N 84.5~150	二甲苯
7	邻甲基对苯二(对辛氧基苯甲酸酯)	*o*-methyl *p*-phenylene-bis(*p*-octyloxy benzoate)	MPBOB		—	N 72~155	酚

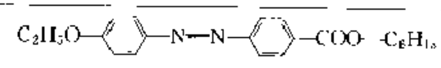
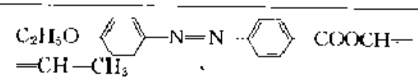
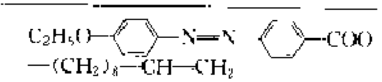
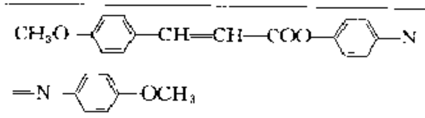
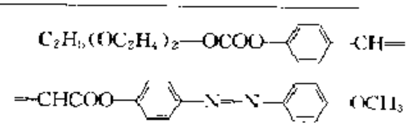
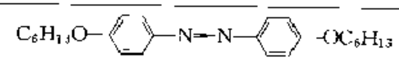
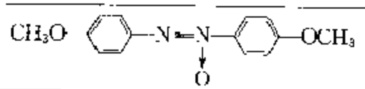
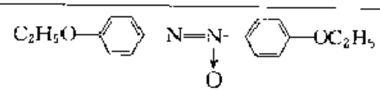
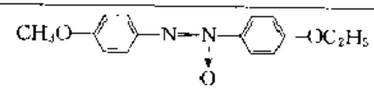
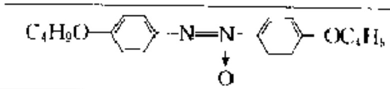
续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	液晶相温度/℃	应用范围
8	邻乙基对苯二（对丙基苯甲酸酯）	*o*-ethyl-*p*-phenylene bis-(*p*-propylbenzoate)			—	N 57～118	
9	邻乙基对苯二（对丁基苯甲酸酯）	*o*-ethyl-*p*-phenylene bis (*p*-butyl benzoate)	—			N 52～91	
10	邻乙基对苯二（对戊基苯甲酸酯）	*o*-ethyl-*p*-phenylene-bis (*p*-amylbenzoate)	—		—	N 63～100	
11	邻乙基对苯二（对己基苯甲酸酯）	*o*-ethyl-*p*-phenylene-bis (*p*-hexyl benzoate)	—		—	N 44～80	
12	对,对联苯二(对正丁氧基苯甲酸酯)	*p*,*p'*-diphenylene bis (*p*-*n*-butoxybenzoate)	—		—	S N 171～181～358 （分解）	
13	对,对联苯二(对正庚氧基苯甲酸酯)	*p*,*p'*-diphenylene bis-(*p*-*n*-heptyloxy benzoate)	—		—	S N 150～210～316	
14	2,6-二萘基双[对甲基苯甲酸酯]	2,6-dinaphthyl bis-(*p*-toluate)	—		—	N 207～318	萘
15	2,6-二萘基双[对甲氧基苯甲酸酯]	2,6-dinaphthyl bis-(*p*-anisate)	—		—	N 220～350	

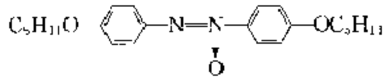
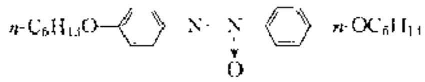
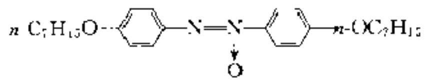
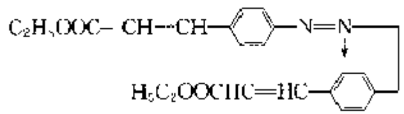
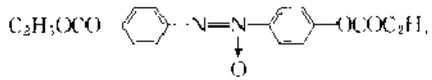
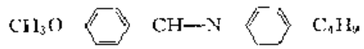
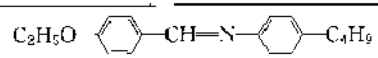
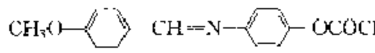
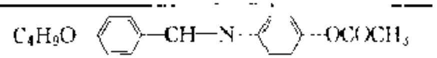
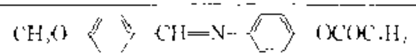
续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	液晶相温度/℃	应用范围
16	2,6-二萘基双[对戊氧基苯甲酸酯]	2-6 dinaphthyl bis-(*p*-*n* pentyloxybenzoate)			--	N 145～272	
17	2,6-二萘基对双[己氧基苯甲酸酯]	2,6-dinaphthyl bis-(*p*-*n*-hexyloxy benzoate)	—			N 139～258	
18	2,6-二萘基双[对庚氧基苯甲酸酯]	2,6 dinaphthyl bis-(*p*-*n*-heptyloxy benzoate)	—		—	N 153～245	
19	2,6-二萘基双[对正壬氧基苯甲酸酯]	2,6-dinaphthyl bis (*p*-*n* nonyloxybenzoate)			-	N 114～227	
20	1,4-二萘基双[对己氧基苯甲酸酯]	1,4 dinaphthyl bis-(*p*-hexyloxybenzoate)			—	N 155～171	
21	1,5-二萘基双[对己氧基苯甲酸酯]	1,5 dinaphthyl bis-(*p*-hexyloxybenzoate)	--		—	N 171～173	
22	对庚氧基苯甲酸	*p*-heptyloxy benzoic acid	H_pB		D	S 92～N 98～146	
23	对辛氧基苯甲酸	*p* octyloxy benzoic acid	OB		D	S 101～N 108～147	
24	对己氧基肉桂酸	*p* hexyloxy cinnamylic acid			-	N 153～181.5	

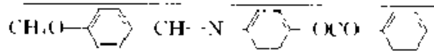
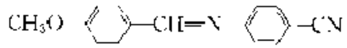
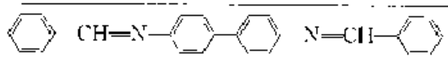
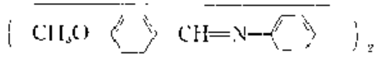
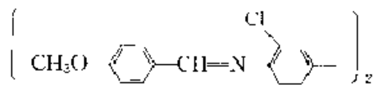
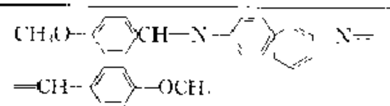
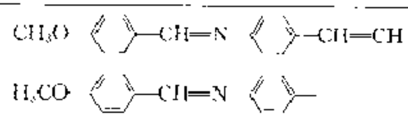
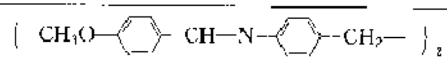
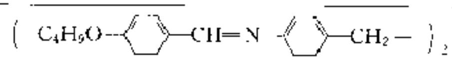
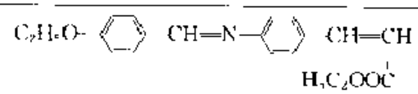
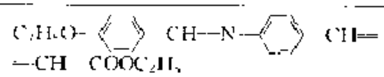
续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	液晶相温度/℃	应用范围
25	对(对乙氧基苯偶氮基)-庚酸苯酯	*p*-(*p* ethoxyphenylazo)phenyl heptanoate	EPAPH		—	N 60.1~120	
26	对(对乙氧基苯偶氮)苯基丁烯酸酯	*p*-(*p* ethoxyphenylazo)phenylcrotonate	—		A,D	N 110~197	苯衍生物
27	对(对乙氧基苯偶氮基)-十一碳烯酸苯酯	*p*(*p*-ethoxyphenylazo) phenyl undecylenate	EPAPU		D	N 65~110	
28	对甲氧基[对(对甲氧苯基)偶氮]肉桂酸苯酯	cinnamic acid *p*-methoxy [*p*-(*p*-methoxyphenyl) azo] phenyl ester	-		—	N 175~>340	
29	4-甲氧基-4[(2,2-乙氧基乙苯乙氧羰氧基苯基)丙烯酰氧基]偶氮苯	4-methoxy-4-[(2,2 ethoxy ethoxy-ethoxy carbonyloxy Phenyl)-acryloyloxy]-azobenzide	—		—	N 75~>230	
30	4,4'-二己氧基偶氮苯	4, 4'-di-hexyloxyazobenzene	PH,A,B		—	S N 96~100~116	二乙烯基苯
31	对,对'二甲氧基氧化偶氮苯	*p*, *p*' di-methoxyazoxybenzene	PAA		D	N 118~135	
32	对,对'二乙氧基氧化偶氮苯	*p*,*p*'-di-ethoxy azoxybenzene	PE,A		A,D	M 135~165	二甲苯、氯甲苯、甲乙苯
33	对甲氧基对'乙氧基氧化偶氮苯	*p* methoxy-*p*'-ethoxy azoxybenzene	—		—	N 93.5~149.6	
34	对,对'二丁氧基氧化偶氮苯	*p*,*p*' di butoxyazoxybenzene	PB,A		—	N 104.5~136	

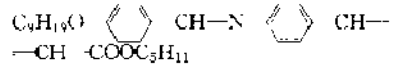
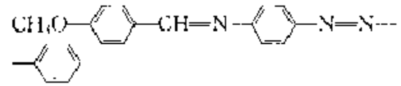
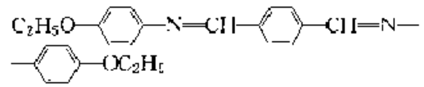
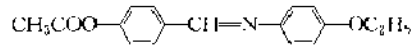
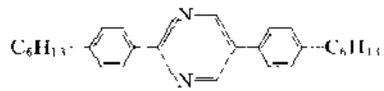
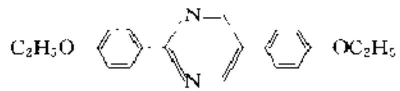
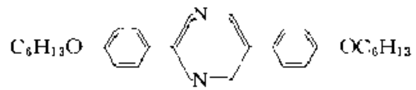
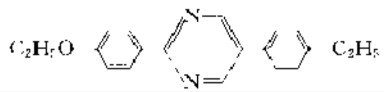
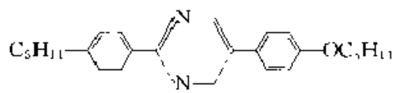
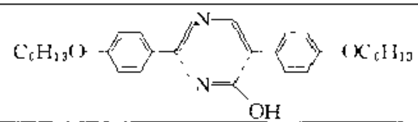
续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	液晶相温度/°C	应用范围
35	对,对'二戊氧基氧化偶氮苯	*p*, *p*'-di-amoxyazoxybenzene	PA_mA			N 75.5~123.2	
36	对,对'二正己氧基氧化偶氮苯	*p*, *p*' di *n*-hexyloxy azoxybenzene	PH_xA		—	S N 71~80~130	二甲苯
37	对,对'二正庚氧基氧化偶氮苯	*p*, *p*'-di-*n*-heptyloxy azoxybenzene	PH_pA		—	S N 74.4~95.4~124.2	二甲苯
38	二乙基对氧化偶氮肉桂酸酯	di-ethyl *p*-azoxycinnamate	—		—	S 140~251(分解)	二卤代苯
39	对,对'二乙氧羰基氧化偶氮苯	*p*, *p*'-di-ethoxy Carbonyl azoxybenzene	—		—	S 114~120	
40	对,甲氧基亚苄基对丁基苯胺	*p* methoxybenzylidene *p*'-butylaniline	MBBA		—	N 20~42	
41	对乙氧基亚苄基对'丁基苯胺	*p*-ethoxybenzylidene-*p*' butylaniline	EBBA		-	N 35~77	
42	对甲氧基亚苄基对'乙酸基苯胺	*p*-methoxybenzylidene-*p*'-acetoxyaniline	APAPA		—	N 81~109	
43	对丁氧基亚苄基对'乙酸基苯胺	*p*-butoxybenzylidene-*p*'acetoxyaniline	BPAPA			N 83~114	二甲基吡啶
44	对[(对甲氧基亚苄基)氨基]苯基丁酸酯	*p* [(*p* methoxybenzylidene) amino] phenylbutyrate	APAPB		—	N 53~112	

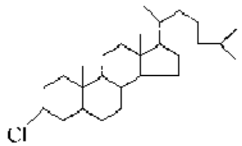
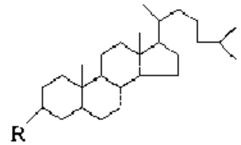
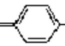
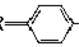
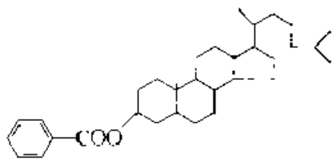
续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	液晶相温度/℃	应用范围
45	对[(对甲氧基亚苄基)氨基]苯基苯甲酸酯	p-[(p-methoxybenzylidene)amino]-phenylbenzoate				N 118~.68	
46	4-甲氧基亚苄基-4'-氰基苯胺	4-methoxybenzylidine 4'-Cyanoaniline			—	N 106~117	
47	4,4'双亚苄基联苯胺	4,4' bis benzylidene-benzidine	--		—	N 239~265	溴苯、一甲基硝基苯
48	双(对甲氧基亚苄基)联苯胺	bis-(p methoxybenzylidine benzidine)	—		—	N 266~390	
49	4,4'-双(对甲氧基亚苄基)-3,3'-二氯联苯胺	4,4' bis(p methoxybenzylidene) 3,3' dichlorobenzidine			—	N 154~363 (分解)	甲基联苯
50	2,6-二(对甲氧基苯亚甲氨基)萘	2,6 bis(p-methoxy benzylidene amino) naphthalene			—	N 189~356	
51	双(对甲氧基亚苄基)4,4'-二氨基芪	bis-(p-methoxybenzylidene) 4,4'diaminostilbene	—			N 270~>340	氯萘
52	N,N'双(对甲氧基亚苄基)α,α'二对甲苯胺	N,N'-bis-(p-methoxybenzylidene)-α,α' bi p-toluidine	BMBT		A,D	N 181~320	多环芳烃、甾族异构体
53	N,N'-双(对丁氧基亚苄基)-α,α'-二对甲苯胺	N,N'-bis[p butoxy benzylidene]-α,α' bi p toluidine	BBBT			S N 159~188~303	多环芳烃
54	乙基-4-(对乙氧基苯亚甲氨基)肉桂酸酯	ethyl-4-(p-ethoxybenzylideneamino)cinnamate	—			S 78~118 S N 118~157~160	
55	乙基-4-(对庚氧基苯亚甲氨基)肉桂酸酯	ethyl-4-(p-n-heptyloxybenzylideneamino) Cinnamate			--	S 120~136	

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	液晶相温度/℃	应用范围
56	4 对壬氧基苯亚甲氨基肉桂酸戊酯	*n*-amyl-4-*p*-*n*-nonyloxybenzylideneamino cinnamate	—		—	S 77.6～94.6 S N 94.6～102.7～137.2	
57	对(甲氧基苯亚甲氨基)偶氮苯	*p* (methoxybenzylidene amino) azobenzene	—			N 151～185	
58	双酰替乙氧基苯胺基对苯二甲醛	bis Phenetidylterephthalaldehyde	—		A,D	N 200～320	苯二甲酸酯、萘酚、苄基吡啶、氯甲苯
59	对乙酰氧基亚苄基对乙氧基苯胺	*p* acetoxybenzylidene *p*-phenetidine	PABPP		—	N 117～135.5	
60	2,5 双(4 己基苯基)嘧啶	2,5-bis-(4-hexyl Phenyl)Pyrimidine	—		—	S 104～185	
61	2,5 双(4-乙氧基苯基)-嘧啶	2,5 bis(4 ethoxyphenyl)-pyrimidine				N 196～270	
62	2,5-双(4-己氧基苯基)嘧啶	2,5 bis (4-hexoxyphenyl)-pyrimidine				S N 120～189～215.5	
63	2(4 乙氧基苯基)-5-(4-乙基苯基)嘧啶	2 (4 ethoxyphenyl) 5-(4-ethylphenyl)-pyrimidine	—		—	N 153～214.5	
64	2-(4-戊基苯基)-5-(4 戊氧基苯基)嘧啶	2 (4 amylPhenyl)-5-(4-amoxyphenyl)pyrimidine	—			S_x S_F 79～102.7～ S_C S_A 113.8～114～210	
65	2,5 双(4 己氧基苯基)-4-羟基嘧啶	2,5 bis-(4 hexoxyphenyl)-4-hydroxypyrimidine			—	S_C S_A 202～287～288	

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	液晶相温度/℃	应用范围
66	胆甾烯基氯	Cholestene chloride	CC			Ch (62)～97	
67	胆甾醇乙酸酯	Cholesteryl acetate	CA	 其中 $R=CH_3COO$	—	Ch (94.5)～116.5	
68	胆甾醇丁酸酯	Cholesteryl butyrate		结构同"67"，$R=C_3H_7COO$		Ch 102～113	
69	胆甾醇戊酸酯	Cholesteryl valeranate		结构同"67"，$R=C_4H_9COO$	—	Ch 93～101.5	
70	胆甾醇壬酸酯	Cholesteryl nonanoate	CN	结构同"67"，$R=C_8H_{17}COO$	D	S Ch 77.5～79～90.5	二甲苯
71	胆甾醇肉豆蔻酸酯	Cholesteryl myristiate		结构同"67"，$R=C_{13}H_{27}COO$	—	S Ch 71～81～86.1	
72	胆甾醇二十(烷)酸酯	Cholesteryl arachidate		结构同"67"，$R=C_{19}H_{39}COO$	—	S Ch (74.3)～78.1～85	
73	胆甾醇苯甲酸酯	Cholesteryl benzoate		结构同"67"，R=—COO	—	Ch 149～180	间与对芳烃异构体
74	胆甾醇肉桂酸酯	Cholesteryl Cinnamate		结构同"67"，R=—CH=CH COO	A,D	Ch 162.6～215.2	间与对芳烃异构体
75	胆甾醇油烯基碳酸酯	Cholestoryl oleylcarbonic estor	COC	结构同"67"， $R=CH_3-(CH_2)_7-CH=CH-(CH_2)_8-OCOO$	—	S Ch <0～17～34	
76	胆甾烷醇苯甲酸酯	Cholestanol benzoate			—	Ch 146～179	二甲苯、甲基苯甲酸

续表

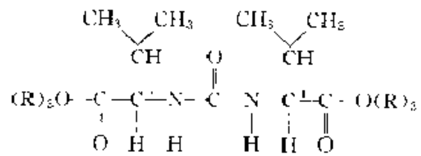
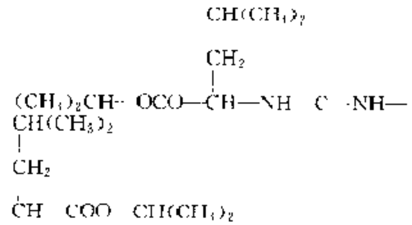
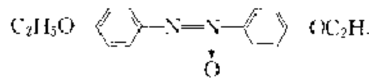
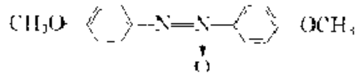
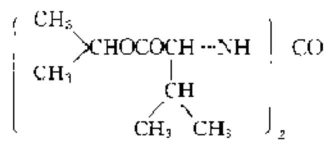
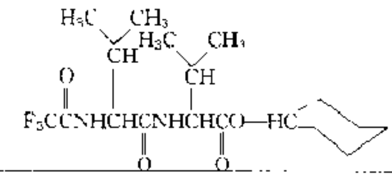
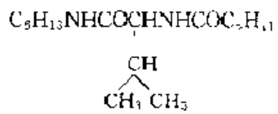
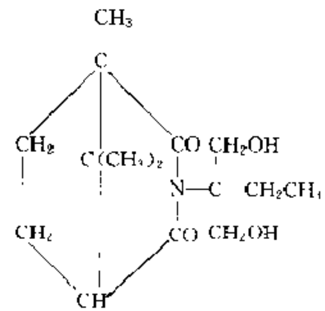
序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	液晶相温度 °C	应用范围
77	碳酰双(L-缬氨酸甲酯)	carbonyl bis-(L-valine methyl ester)		 其中 R=CH_3	-	S 9～142	N-全氟酰基 2 氨基烷基苯对映体
78	碳酰双(L 缬氨酸乙酯)	carbonyl-bis-(L valine ethyl ester)		结构同"77",R—C_2H_5	—	S 88～115	N-全氟酰基-2-氨基烷基苯对映体
79	碳酰双(L 缬氨酸异丙酯)	carbonyl-bis (L valine isopropyl ester)		结构同"77",R—$(CH_3)_2CH$	--	S S' 91～99～109	N-全氟酰基 2 氨基烷基苯对映体
80	碳酰双(L-缬氨酸叔丁酯)	carbonyl bis (L valine t butylester)		结构同"77",R—$(CH_3)_3C$		S −175～129	N-全氟酰基-2-氨基烷基苯对映体
81	碳酰双(D-亮氨酸异丙酯)	carbonyl bis (D leucine isopropyl ester)			—	S 50～110	N 全氟酰基-2 氨基烷基苯对映体
82	4,4'-氧化偶氮一苯乙醚	4,4'-azoxyphenetole			A,D	138～168	二甲苯、氯甲苯、甲乙苯
83	4,4'-氧化偶氮一苯甲醚	4,4'-azoanisole			D	118～135	

表 5-44 旋光类物质固定液

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
1	L-α-氨基异戊酸异丙酯酰脲	Ureide of L Valine isopropyl ester			Ee	-	120	分离环胺立体异构体，分离旋光性伯胺
2	N-三氟乙酰L异戊氨酰-L-α-氨基异戊酸环己酯	N-trifluoroacetyl L Valyl L-Valine Cyclohexyl ester			Ee	90	110	α-氨基酸旋光异构体的三氟乙酰衍生物（柱温须高于110℃）
3	N-三氟乙酰-L-苯基丙氨酰L-异己氨酸环己酯	N trifluoroacetyl-L-phenylalanyl-L-leucine cyclobexyl ester	--		Ee	--	110	同"2"（效率较高）
4	N-己酰-L-α-氨基异戊酸正己基酰胺	N-Caproyl L Valine-n-hexyl amide			—	—	145	与"2""3"相似
5	N-[2-(2-乙基-1，3-二羟基)丙基]D-樟脑酰亚胺	N-[2-(2-ethyl-1,3 dihydroxylpropyl)]-D camporimide	—			—	<170	萜烯、类萜烯化合物

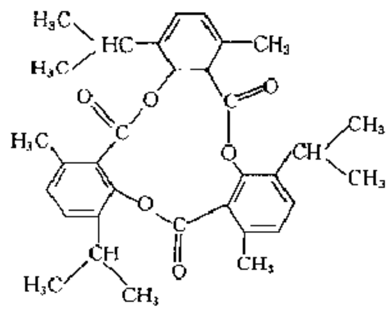
续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
6	N-三氟乙酰-L-苯基丙氨酰-L-天冬氨酸双环己基酯	N-trifluroacetyl-L-phenylalanyl-L-aspartic acid bis (cyclohexyl)ester		$C_6H_{11}OCCH_2CH(COOC_6H_{11})NHC(O)CH(CH_2C_6H_5)NHCCF_3$ (H, H; O, O)		95	160	
7	N-廿二酰-L-α-氨基异戊酸-2-(2-甲基)正十七基酰胺	N-docosanoyl-L-valine-2-(2-methyl)-n-heptadecylamide		$CH_3(CH_2)_{20}C(O)NHCH(CH(CH_3)_2)C(O)NHC(CH_3)_2(CH_2)_{14}CH_3$	—	65	200	

表 5-45 其他类固定液

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
1	二甲基二(十八烷基)季胺皂土(即"montmorillonite"型有机皂土经长链烷基季铵处理的产物)	dimethyldioctadecyl ammonium bentonite	Bentone 34	$[(CH_3)_2(C_{18}H_{37})_2N)]^+ + [Al_2O_3(SiO_2)_x \cdot H_2O]$	B、D、T(可悬浮于B或D中成为触变胶后再与载体结合)	50	150	芳烃(包括多环芳烃)和脂肪烃、环烷烃的位置异构物，例如邻、间、对位的二甲苯，但峰形不对称，需用其他固定液(如硅油或邻苯二甲酸酯)改性
2	有机皂土	…	Bentone 245	—	—		—	用凡士林改性可分离二甲苯异构物
3	有机皂土("beidelite"型有机皂土经长链烷基季铵处理的产物)	long chain alkyl ammonium bentonite	—	—	—	—	190	对二甲苯异构物的分离效率显著地优于 Bentone 34，不需涂固定液

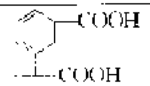
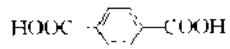
续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃		应用范围
						最低	最高	
4	邻百里酸二交内酯	tri o-thymotide				—	>100	按分子形状进行分离，狭长的直链分子可进入空间或孔道，而宽的支化分子被排斥
5	脱氧胆酸/磷酸三甲苯饱和溶液	desoxycholic acid in tritolyl phosphate (saturated solution)	—	—	乙酸异丁酯	—	-	可与适宜尺寸的分子形成“包留化合物”，按分子形状分离化合物，对直链烃的保留值较支化烃大得多
6	有机皂土-34和苯二甲酸二癸酯混合(1+1)	bentone34+didecyl phthalate(1∶1mix)	—	—	B	20	50	二甲苯异构体
7	水	water		H_2O		—	-	对于烃类化合物能在其沸点以下(200～300)℃的柱温进行快速分析，含氧化合物(如醇)的保留值与分子量成反比
8	丝状氧化铝	colloidal alumina	Baymal	—	T	—	300	
9	22%胶状二氧化硅的水+异丙醇溶液	22%solution of colloidal silica in H_2O-isopanol	Nalcoag-1022	—	—	—	—	
10	甲苯和萘-甲醛树脂	toluene and naphthalene formaldehyde resins	—	—	—		甲苯：150 萘：200	
11	羊毛脂	lanolin	—	醇、酯、聚酯的复杂混合物	—	—	150	芳香族化合物、醇、精油

续表

序号	中文名称	英文名称	商品名称或其他名称	分子式或结构式	溶剂	使用温度/℃ 最低	使用温度/℃ 最高	应用范围
12	交联(酯-醛缩醇)的聚合物	poly(ester acetals) crosslinked					>300	C[illegible]以上脂肪酸酯
13	香豆酮-(聚)茚树脂	coumarone-indene resin			C	—	185	
14	二元酸+硅油550(1+1)	Empol1018 + silicone oil DC 550(1+1)	—	—	A	20	150	脂肪酸

表 5-46 减尾剂

序号	中文名称	英文名称	分子式或结构式	应用范围	备注
1	己二酸	adipic acid	$HOOCCH_2CH_2CH_2CH_2COOH$	脂肪酸	加入聚酯中
2	癸二酸	sebacic acid	$HOOCCH_2CH_2CH_2CH_2CH_2CH_2COOH$	脂肪酸	
3	硬脂酸	stearic acid	$CH_3(CH_2)_{16}COOH$	脂肪酸、醇	加入硅油中
4	三元酸	trimer acid	90%C_{54}三元酸+10%C_{36}二元酸	酚、甲酚、二甲酚	
5	间苯二甲酸	isophthalic acid		含氧化合物水溶液	
6	对苯二甲酸	terephthalic acid		脂肪酸	加入Carbowax 20M中
7	二壬基萘二磺酸	dinonylnaphthalene disulfonic acid	—	含氧化合物水溶液	
8	C_{16}~C_{18}脂肪伯胺	Armeen SD (C_{16} ~ C_{18} primary aliphatic amines)	—	吡啶化合物、水中肼化合物	
9	三乙醇胺	triethanolamine	$(CH_2CH_2OH)_3N$	吡啶化合物、水中肼化合物	
10	四乙烯五胺	tetraethylene pentamine	$NH_2(CH_2CH_2NH)_3CH_2CH_2NH_2$	胺类化合物	涂敷在聚苯乙烯类多孔小球上
11	聚乙烯亚胺	polyethylene imine		胺类化合物	涂敷在聚苯乙烯类多孔小球上
12	氢氧化钠	sodium hydroxide	$NaOH$	胺类化合物	
13	磷酸	phosphoric acid	H_3PO_4	胺类化合物	加入聚酯类固定液中，或涂在苯乙烯类多孔小球上

（二）固定液 McReynolds 常数

固定液对组分的选择性，取决于固定液与组分彼此分子间相互作用的程度，即相互间形成的内聚力、氢键作用力、某些特殊作用力的大小，于是人们常用固定液 McReynolds 常数来表征固定液的性质[7~11]，现按固定液英文名称字母顺序和 CP 值大小的顺序，分别编排了固定液 McReynolds 常数表（表 5-47 与表 5-48），定量地显示出一些固定液的性质，供选用固定液时参考。

在表 5-47 与表 5-48 中：

（1）溶剂缩写

A 丙酮； B 苯； C 氯仿；

D 二氯甲烷 E 乙醇； Ee 乙醚；

H 己烷； M 甲醇； P 石油醚；

T 甲苯； W 水

（2）McReynolds 常数

X' —— $\Delta I^{固定液}_{苯}$ Y' —— $\Delta I^{固定液}_{丁醇}$

Z' —— $\Delta I^{固定液}_{2-戊酮}$ U' —— $\Delta I^{固定液}_{硝基丙烷}$

S' —— $\Delta I^{固定液}_{吡啶}$

（3）CP 值

$$CP\ 值=\frac{\sum_{1}^{5}\Delta I^{固定液}}{\sum_{1}^{5}\Delta^{OV-275}}\times 100$$

$$=\frac{\sum_{1}^{5}\Delta I^{固定液}}{629+872+763+1106-849}\times 100$$

表 5-47 固定液 McReynolds 常数表（按英文字母排序）

固 定 液	说 明	使用温度/℃		McReynolds 常数					CP 值	溶剂
		最低	最高	X'	Y'	Z'	U'	S'		
Acetyltributyl citrate	柠檬酸乙酰三丁酯	20	180	135	268	202	314	233	27	A
Apiezon H	饱和烃润滑脂	20	250	59	86	81	151	129	12	T
Apiezon J	饱和烃润滑脂	20	250	38	36	27	49	57	5	T
Apiezon L	饱和烃润滑脂	50	250	32	22	15	32	42	3	T
Apiezon M	饱和烃润滑脂	50	300	31	22	15	30	40	3	T
Apiezon N	饱和烃润滑脂	50	300	38	40	28	52	58	5	T
Apiezon T	饱和烃润滑脂	-	-	41	—	30	55	82	—	T
Apolane -87	八十七烷	35	260	21	10	3	12	35	2	T
AT 220	—	0	180	117	380	181	293	133	26	C
Atpet 200	—	—	—	108	282	186	235	289	26	C
Beeswax	蜂蜡	—	200	43	110	61	88	122	10	C
N,N-Bis-(2-cyanoethyl) formamide	N,N-双(2-氰乙基)甲酰胺	20	125	690	991	853	1110	1000	110	M,C
Bis-(2 ethoxyethoxyethyl) Phthalate	二(乙氧基乙氧基乙基)邻苯二甲酸酯	—	150	233	408	317	470	389	43	A,C
Bis(2 Ethylhexyl) tetrachlorophthalate	二(2-乙基己基)四氯邻苯二甲酸酯	0	150	112	150	123	168	181	17	A
Butanediol succinate	聚丁二醇丁二酸酯	50	230	370	571	448	657	611	63	C,D

续表

固定液	说明	使用温度/℃		McReynolds 常数					CP 值	溶剂
		最低	最高	X'	Y'	Z'	U'	S'		
Butoxyethyl stearate	硬脂酸丁氧基乙酯	—	—	56	135	83	136	97	12	-
Butyloctyl phthalate	邻苯二甲酸丁辛酯	—	—	97	194	157	246	174	21	M,D
Butyl stearate	硬脂酸丁酯			41	109	65	112	71	9	E,Ee
Carbowax 400	聚乙二醇 400	20	100	333	653	405	—	—		C,A
Carbowax 600	聚乙二醇 600	30	120	323	583	382			63	C,A
Carbowax 1000	聚乙二醇 1000	40	150	347	607	418	626	589	61	C,A
Carbowax 1450	聚乙二醇 1450	50	175	371	639	453	666	641	66	C
Carbowax 3350	聚乙二醇 3350	60	200	317	545	378	578	521	56	C
Carbowax 4000 monostearate	聚乙二醇 4000 单硬脂酸酯	60	200	282	496	331	517	467	50	C
Carbowax 6000	聚乙二醇 6000	60	200	322	540	369	577	512	55	C,A
Carbowax 20M	聚乙二醇 20M	60	250	322	536	368	572	510	55	C
Carbowax 20M-TPA (terephthalic acid)	聚乙二醇 20M TPA	60	250	321	537	367	573	520	54	C,D
Castorwax	蓖麻蜡	90	200	108	265	175	229	246	24	C
Celanese ester No. 9	内烷三壬酸三甲酯	20	200	84	182	122	122	143	16	A,C
Convoil 20	酞酸二癸酯	25	175	14	14	8	17	21	2	A,C
Cresyl Diphenyl phosphate	磷酸-甲苯基二苯酯	20	125	199	351	285	413	336	38	B,C
Cyanoethyl sucrose	氰乙基蔗糖	20	200	647	919	797	1043	976	104	C
Cyclohexanedimethanol succinate	环己烷二丁醇丁二酸酯	100	250	269	446	328	493	481	48	C
DC 11	甲基硅脂 DC-11	30	300	17	86	48	69	56	7	T,C
DC 200	甲基硅油 DC-200	0	250	16	57	45	66	43	5	T,C
DC 330	甲基硅油 DC-330			13	51	42	61	36	5	—
DC 410	甲基硅橡胶 DC-410	50	300	18	57	47	68	44	6	A
DC 510	苯基甲基聚硅氧烷 DC 510	—	—	25	65	60	89	57	7	T
DC 550	苯基甲基聚硅氧烷 DC 550	0	250	81	124	124	189	145	15	T,A
DC 556	苯基甲基聚硅氧烷 DC 556	—	—	37	77	80	118	79	9	T
DC 560	对氯苯基甲基聚硅氧烷 DC-560	0	270	32	72	70	100	68	8	T
DC 702	苯基甲基聚硅氧烷 DC 702	0	225	77	124	126	189	142	15	C
DC 703	九甲基三苯基五硅氧烷 DC 703		225	76	123	126	189	140	16	C
DC 710	苯基甲基聚硅氧烷 DC-710	0	250	107	149	153	228	190	20	A
Dexsil 300(carborane methyl silicone)	聚碳硼烷硅氧烷	40	400	47	80	103	148	96	11	C
Dexsil 400(carborane phenyl silicone)	聚碳硼烷硅氧烷	50	370	59	114	140	187	173	20	C
Dexsil 410(carborane-nitrile silicone)	聚碳硼烷硅氧烷	50	360	85	165	169	242	180	20	C
Di-(2-butoxyethyl) adipate	己二酸二丁氧基乙酯	20	—	137	278	198	300	235	27	D
Di(2-butoxyethyl) phthalate	邻苯二甲酸二丁氧基乙酯	20	175	157	292	233	348	272	31	C,M
Diisodecyl adipate	己二酸二异癸酯	0	150	71	171	113	185	123	16	M,A
Diisodecyl phthalate	邻苯二甲酸二异癸酯	0	150	84	173	137	218	155	18	M,A

续表

固定液	说明	使用温度/℃		McReynolds 常数					CP值	溶剂
		最低	最高	X'	Y'	Z'	U'	S'		
Dicyclohexyl phthalate	邻苯二甲酸二环己酯	—	—	146	257	206	316	245	28	
Didecyl phthalate	邻苯二甲酸二癸酯	50	150	136	255	213	320	235	27	A
Di-(2 ethoxyethyl) phthalate	邻苯二甲酸二乙氧基乙酯	—		214	375	305	416	364	40	
Di-(2-ethoxyethyl) sebacate	癸二酸二乙氧基乙酯	—	150	151	306	211	320	274	30	A
Diethylene glycol acipate(DEGA)	聚二乙二醇己二酸酯	20	210	378	603	460	665	658	66	A,C
Diethylene glycol stearate(DEG)	聚二乙二醇硬脂酸酯		175	64	193	106	143	191	17	C
Diethylene glycol succinate(DEGS)	聚二乙二醇丁二酸酯	20	200	496	746	590	837	835	81	A,C
Di (2-ethylhexyl) phthalate	邻苯二甲酸二(2 乙基己基)酯		150	135	254	213	320	235	27	D,M
Di (2-ethylhexyl) sebacate	癸二酸二(2 乙基己基)酯	0	125	72	168	108	180	125	15	A,C
Di (2 ethylhexyl) tetrachlorophthalate	四氯邻苯二甲酸二(2-乙基己基)酯	0	150	109	132	113	171	168	16	A,D
Diglycerol	双甘油	20	150	371	826	560	676	854	78	C,M
Dilauryl phthalate	邻苯二甲酸二月桂酯	—	150	79	153	120	192	158	17	A,C
Dinonyl phthalate	邻苯二甲酸二壬酯	20	150	83	183	147	231	159	19	D,A
Dinonyl sebacate	癸二酸二壬酯	0	125	66	166	107	178	118	15	A
Diisooctyl adipate	己二酸二异辛酯	0	125	76	181	121	197	134	17	M
Diisoctyl phthalate	邻苯二甲酸二异辛酯	0	150	94	193	154	243	174	20	M,A
Dioctyl phthalate	邻苯二甲酸二辛酯	0	150	92	186	150	236	167	20	M,A
Dioctyl sebacate	癸二酸二辛酯	0	125	72	168	108	180	123	15	A,C
Ditridecyl phthalate	邻苯二甲酸二(十三烷基)酯	—	—	75	156	122	195	140	16	A
E 301	甲基硅橡胶 E-301	50	350	15	56	44	66	40	5	T
ECNSS-M	乙二醇丁二酸/氰乙基硅氧烷共聚物	30	180	421	690	581	803	732	76	C
EGSP Z	乙二醇丁二酸酯/苯基甲基硅氧烷共聚物	50	230	308	474	399	548	549	54	C
EGSS X	乙二醇丁二酸酯/甲基硅氧烷共聚物	90	200	484	710	585	831	778	80	C
EGSS-Y	乙二醇丁二酸酯/甲基硅氧烷共聚物	100	230	391	597	493	693	661	67	C
Elastex 50-B	乳化沥青 50-B	—	—	140	255	209	318	239	28	—
Emulphor ON-870	聚乙二醇十八醚	40	200	202	395	251	395	344	38	M,C
Epon 1001	环氧树脂 Epon 1001	50	200	284	489	406	539	601	55	C
Estynox 100	环氧增塑剂	0	175	136	257	182	285	227	26	C
Ethofat 60/25	聚乙二醇单硬脂酸酯	50	175	191	382	244	380	333	36	C,A
Ethomeen 18/25	十八碳酰胺与环氧乙烷的缩合物	—	—	176	382	230	353	323	35	
Ethomeeh S/25	大豆脂肪胺与环氧乙烷的缩合物	—	75	186	395	242	370	339	36	C
Ethylene glycol adipate(EGA)	聚乙二醇己二酸酯	100	200	372	576	453	655	617	63	C,A
Ethylene glycol isophthalate	聚乙二醇间苯二甲酸酯	100	200	326	508	425	607	561	58	C
Ethylene glycol phthalate	聚乙二醇邻苯二甲酸酯	100	200	453	697	602	816	872	82	C

续表

固定液	说明	使用温度/°C		McReynolds 常数					CP 值	溶剂
		最低	最高	X′	Y′	Z′	U′	S′		
Ethylene glycol succinate(EGS)	聚乙二醇丁二酸酯	100	200	537	787	643	903	889	89	C
Ethylene glycol tetrachlorophthalate	聚乙二醇四氯邻苯二甲酸酯	100	200	307	345	318	128	466	44	C
Flexol 8N8	N,N 二(2-乙基己酸乙酯)替-2乙基己酸酰胺	20	190	96	254	164	260	179	23	D,C
Fluorolube HG 1200	聚全氟氯代烯 HG 1200	50	200	51	68	114	144	118	12	A
Free fatty acid phase (FFAP)	聚乙二醇 20M 与 2-硝基对苯二甲酸的反应产物	60	275	310	580	397	602	627	60	C
Halleomid M 18	N,N-二甲基油酸酰胺 M18	40	150	79	268	130	222	146	20	C,A
Halleomid M-18 OL	N,N 二甲基油酸酰胺 M 18 OL	30	150	89	230	143	239	165	22	C,M
Halocarbon Oil 10-25	卤碳油 10-25	30	100	47	70	108	133	111	11	C
Halocarbon Oil K 352	卤碳油 K-352	0	250	47	70	73	238	146	11	C
Halocarbon wax	卤碳蜡	50	150	55	71	116	143	123	12	A
Hercoflex 600	聚 1,3 丙二醇癸二酸酯	20	200	112	234	168	261	194	23	C
1,2,3,4,5,6-Hexakis (2 cyanoethoxy) cyclohexane	六(氰乙氧基)环己烷	125	200	567	825	713	978	901	94	T,C
n Hexatriacontane	三十六烷	20	50	12	2	−3	1	11	1	T,B
Hyprose SP 80	八(2-羟丙基)蔗糖	20	200	336	742	492	639	727	70	C,M
Igepal CO-630	聚乙二醇壬基苯基醚 CO 630	30	200	192	381	253	382	344	37	C
Igepal CO-710	聚乙二醇壬基苯基醚 CO 710	—	—	205	397	266	401	361	39	C
Igepal CO-730	聚乙二醇壬基苯基醚 CO-730	-	—	224	418	279	428	379	41	C
Igepal CO 880	聚乙二醇壬基苯基醚 CO-880	100	200	259	461	311	482	426	46	C,A
Igepal CO 990	聚乙二醇壬基苯基醚 CO-990	100	220	298	508	345	540	475	51	A
Kel F Wax	聚三氟氯乙烯蜡	—	200	55	67	114	143	116	12	C
LAC 1-R-296	聚二乙二醇己二酸酯	20	210	377	601	458	663	655	65	A
LAC-2-R-446	聚二乙二醇己二酸季戊四醇交联聚酯	20	200	387	616	471	679	667	67	A
LAC 3 R 728	聚二乙二醇丁二酸酯	20	200	502	755	597	849	852	84	A
LSX-3-0295	聚氟代烷基硅氧烷	—	250	152	241	366	479	319	37	—
Montan wax	褐煤蜡	-	—	19	58	14	21	47	4	C
Neopentyl glycol adipate	聚新戊二醇己二酸酯	50	225	234	425	312	462	438	44	C
Neopentyl glycol sebacate	聚新戊二醇癸二酸酯	50	225	172	327	225	344	326	33	C
Neopentyl glycol succinate	聚新戊二醇丁二酸酯	50	225	272	469	366	539	474	50	C
Nujol	矿物油	20	100	9	5	2	6	11	1	T
Octoil S	癸二酸二异辛酯	-	130	72	167	107	179	123	15	A,C
Octyl decyl adipate	己二酸辛癸酯		125	79	179	119	193	134	17	A
OS 124	聚间苯醚 OS 124	0	200	176	227	224	306	283	29	T

续表

固定液	说明	使用温度/℃ 最低	最高	McReynolds常数 X'	Y'	Z'	U'	S'	CP值	溶剂
OS 138	聚间苯醚 OS 138	0	200	182	233	228	313	293	30	T
OV-1	甲基硅橡胶 OV-1	100	350	16	55	44	65	42	5	T,C
OV 3	苯基甲基聚硅氧烷 OV 3	0	350	44	86	81	124	88	10	T,C
OV-7	苯基甲基聚硅氧烷 OV-7	0	350	69	113	111	171	128	14	T,C
OV-11	苯基甲基聚硅氧烷 OV 11	0	350	102	142	145	219	178	18	T,C
OV-17	苯基甲基聚硅氧烷 OV-17	0	375	119	158	162	243	202	21	T,C
OV-22	苯基甲基聚硅氧烷 OV-22	0	350	160	188	191	283	253	25	A,C
OV 25	苯基甲基聚硅氧烷 OV-25	0	350	178	204	208	305	280	28	A,C
OV-61	苯基甲基聚硅氧烷 OV-61	0	350	101	143	142	213	174	18	T,C
OV-73	苯基甲基聚硅氧烷 OV 73	0	325	40	86	76	114	85	10	T
OV-101	甲基硅油 OV-101	0	350	17	57	45	67	43	5	C,T
OV 105	氰丙基甲基聚硅氧烷 OV-105	0	275	36	108	93	139	86	11	A
OV 202	三氟丙基甲基聚硅氧烷 OV-202	0	275	146	238	358	468	310	36	C
OV 210	三氟丙基甲基聚硅氧烷 OV-210	0	275	146	238	358	468	310	36	C,A
OV-215	三氟丙基乙烯基甲基聚硅氧烷 OV 215	0	275	149	240	363	478	315	37	E,C
OV-225	氰丙基苯基甲基聚硅氧烷 OV 225	0	275	228	369	338	492	386	43	A
OV-275	氰乙基氰丙基甲基聚硅氧烷 OV-275	25	250	629	872	763	1106	849	100	C,A
OV-330	聚二醇醚	0	250	222	391	273	417	368	40	A,T
OV-351	聚乙二醇 20M 与硝基对苯二甲酸反应物	60	275	335	552	382	583	540	57	C
OV-1701	氰丙基苯基乙烯基甲基聚硅氧烷 OV-1701	20	300	67	170	153	228	171	19	A
Paraplex G 25	聚丙二醇癸二酸酯 G 25	—	—	189	328	239	368	312	34	—
Paraplex G 40	聚丙二醇己二酸酯 G 40	—		282	459	355	528	457	49	—
Phenyldiethanolamine succinate	聚苯基二乙醇胺丁二酸酯	20	230	386	555	472	674	654	65	A,C
Pluronic F68	聚(乙二醇-丙二醇)		—	264	465	309	488	423	46	—
Pluronic F88	聚(乙二醇-丙二醇)	—	—	262	461	306	483	419	46	—
Pluronic L35	聚(乙二醇-丙二醇)	—	—	206	406	257	398	349	38	
Pluronic L81	聚(乙二醇-丙二醇)	—	—	144	314	187	289	249	28	—
Pluronic P65	聚(乙二醇-丙二醇)	—	—	203	394	251	393	340	37	—
Pluronic P85	聚(乙二醇-丙二醇)	—	—	201	390	247	388	335	37	·
Poly -A 101A	聚酰胺	50	275	115	357	151	262	214	26	C
Poly -A 103	聚酰胺	70	275	115	331	149	263	214	25	C
Poly-A 135	聚酰胺	70	250	163	389	168	340	269	32	C
Polybutene 32	聚丁烯 32	—	·	21	29	24	42	40	4	—
Polybutene 128	聚丁烯 128	—	—	25	26	25	41	42	4	—
Polyethylene glycol 600	聚乙二醇 600	30	120	350	631	428	632	605	63	C,A

续表

固定液	说明	使用温度/℃		McReynolds 常数					CP 值	溶剂
		最低	最高	X'	Y'	Z'	U'	S'		
Polyethylene glycol 4000	聚乙二醇 4000	60	120	325	551	375	582	520	56	C
Polyethylene glycol adipate	聚乙二醇己二酸酯		—	371	579	454	355	633	57	—
Polyethylene imine	聚乙烯亚胺	0	180	322	800	17	573	524	53	M,A
Polyglycol 15 200	聚乙二醇 15-200		—	207	410	262	401	354	39	-
Poly-I110	聚酰胺	90	275	115	194	122	204	202	20	C
Polypropylene glycol 2000(PPG 2000)	聚丙二醇 2000	20	180	128	294	173	264	226	26	C
Polypropyleneimine	聚丙烯亚胺	0	200	122	425	168	263	224	29	C
Polyphenyl ether (5 Ring) OS-124	聚苯醚(五环)	20	200	176	227	224	306	283	29	C,T
Polyphenyl ether (6 Ring) OS 138	聚苯醚(六环)	20	250	182	233	228	313	293	30	C,T
Polytergent B 350	卤碳蜡	—	—	202	392	260	395	353	38	-
Polytergent G-300	卤碳蜡	—	—	203	398	267	401	360	39	-
Polytergent J-300	卤碳蜡	50	150	168	366	227	350	308	34	A
Polytergent J-400	卤碳蜡	50	150	180	375	234	366	317	35	A
QF 1	三氟丙基甲基聚硅氧烷 QF-1	50	200	144	233	355	463	305	36	C,A
Quadrol	N,N,N',N'-四(2羟丙基)乙二胺	0	150	214	571	357	472	489	50	C
Renex 678	聚环氧乙烷基芳基醚	—	-	223	417	278	427	381	4.	A,C
Reoplex 400	聚丙二醇己二酸酯 400	50	210	364	619	449	647	671	65	C
Resoflex R 296	聚丙二醇己二酸酯 R296	50	210	380	609	463	668	667	66	C
SE 30	甲基硅橡胶 SE-30	50	300	15	53	44	64	41	5	T,C
SE 31	聚甲基乙烯基硅氧烷 SE-31	50	300	16	54	45	65	43	5	T,C
SE 33	聚甲基乙烯基硅氧烷 SE-33	50	300	17	54	45	67	42	5	T,C
SE 52	含苯基的聚甲基硅氧烷 SE-52	50	300	32	72	65	98	67	8	T,C
SE 54	聚甲基苯基乙烯基硅氧烷 SE-54	50	300	33	72	66	99	67	8	T,C
SF 96	甲基硅酮 SF-96	0	250	12	53	42	61	37	5	T,C
Silar 5CP	氰丙基苯基甲基聚硅氧烷	50	275	319	495	446	637	531	58	A,C
Silar 7CP	氰丙基苯基甲基聚硅氧烷	50	275	440	638	605	844	673	76	C,A
Silar 9CP	氰丙基苯基甲基聚硅氧烷	50	275	489	725	631	913	778	84	C,A
Silar 10C	氰丙基甲基聚硅氧烷	50	275	523	757	659	942	801	87	C,A
Siponate DS 10	十二烷基苯磺酸钠	20	200	99	569	320	344	388	41	A,C
Sorbitol	山梨糖醇	100	150	232	582	313	—	—	—	M
Sorbitol hexaacetate	山梨糖醇六乙酸酯		100	335	553	449	652	543	60	—
SP-216	甲基硅油 SP-216	25	200	632	875	733	1000	680	94	A
SP-392	苯基甲基聚硅氧烷 SP-392	20	200	133	169	176	258	219	23	—
SP 400	对氯苯基甲基聚硅氧烷 SP-400	0	270	32	72	70	100	68	8	T
SP 525	"芳烃"SP-525	60	270	226	255	253	368	320	34	T
SP-1000	改进的聚乙二醇 20M	60	275	332	555	393	583	546	57	C
SP-1200		25	200	67	170	103	203	166	17	C

续表

固定液	说明	使用温度/℃		McReynolds 常数					CP 值	溶剂
		最低	最高	X'	Y'	Z'	U'	S'		
SP-2100	甲基聚硅氧烷 SP-2100	0	350	17	57	45	67	43	5	C,T
SP 2250	苯基甲基聚硅氧烷 SP-2250	0	375	119	158	162	243	202	21	C,T
SP-2300	氰丙基苯基甲基聚硅氧烷 SP-2300	50	275	322	480	446	636	524	57	A,C
SP 2310	氰丙基苯基甲基聚硅氧烷 SP 2310	50	275	440	637	605	840	670	76	A,C
SP-2320	氰丙基苯基甲基聚硅氧烷 SP-2320	50	270	523	757	659	942	801	87	A
SP-2330	氰丙基苯基甲基聚硅氧烷 SP-2330	50	275	490	725	630	913	778	84	A,C
SP-2340	氰丙基聚硅氧烷 SP-2340	50	275	520	757	659	942	800	88	A,C
SP-2401	三氟丙基甲基聚硅氧烷 SP-2401	0	275	146	238	358	468	310	36	A
Span 60	脱水山梨糖醇单硬脂酸酯	15	150	88	263	158	200	258	23	M,C
Span 80	脱水山梨糖醇单油酸酯	25	150	97	266	170	216	268	24	T
Squalane	角鲨烷	20	120	0	0	0	0	0	0	T,C
Squalene	角鲨烯	0	100	152	341	238	329	344	33	T,C
STAP	聚乙二醇 20M 与对苯二甲酸的反应产物	100	225	345	586	400	610	627	61	..
Sucrose acetate iso butyrate (SAIB)	乙酰蔗糖异丁酸酯	30	200	172	330	251	378	295	34	T,C
Sucrose octaacetate	蔗糖八乙酸酯	—	>200	344	570	461	671	569	62	E
Superox 4	聚乙二醇分子量 40 万	80	250	296	568	349	555	470	43	C
Superox 20M	聚乙二醇分子量 2 万	60	250	321	540	365	572	511	55	C,M
Surfonic N 300	壬基酚与环氧乙烷加合物	100	200	261	462	313	484	427	46	A,C
Tergitol NPX	聚乙二醇的壬基苯基醚	100	200	197	386	258	389	351	37	A,C
Tetracyanoethylated pentaerythritol	四氰乙基季戊四醇	30	175	526	782	677	920	837	89	T,C
Tetrahydroxyethyl enediamine(THEED)	N,N,N',N' 四(2-羟乙基)乙二胺	20	120	463	942	626	801	893	88	M
1,2,3,4-Tetrakis (2-Cyanoethoxy) butane	1,2,3,4-四(2-氰乙氧基)丁烷	110	200	617	860	773	1048	941	101	C
Tributoxyethyl phosphate	磷酸三丁氧基乙酯	20	125	141	373	209	341	274	32	M
Tributyl citrate	柠檬酸三丁酯	—	150	135	286	213	324	262	29	M
Tricresyl phosphate	磷酸三甲苯酯	20	125	176	321	250	374	299	34	M,C
Tri(2 ethylhexyl) phosphate	磷酸三(2乙基己基酯)	20	150	71	288	117	215	132	20	M
Trimer acid	C_{54}三羧酸	20	150	94	271	163	182	378	26	C
Trimethyl propanet ripelargonate	三壬酸三羟甲基丙烷酯	20	200	84	182	122	197	143	17	A,C
1,2,3 Tris(2 cyanoethoxy) propane (TCEP)	1,2,3-三(2-氰乙氧基)丙烷	20	180	593	857	752	1028	915	98	M,C
Triton X-100	聚乙二醇辛基苯基醚	50	200	203	399	268	402	362	39	M,A
Triton X-200	聚乙二醇辛基苯基醚	—	—	117	289	172	266	237	26	A
Triton X-305	聚乙二醇辛基苯基醚	50	200	262	467	314	488	430	46	M,A

续表

固定液	说明	使用温度/℃		McReynolds 常数					CP 值	溶剂
		最低	最高	X′	Y′	Z′	U′	S′		
Triton X 400	聚乙二醇辛基苯基醚	—	—	68	334	97	176	131	19	A
Tween 80	聚环氧乙烷山梨糖醇单油酸酯	0	160	227	430	283	438	396	42	M
UC L46	甲基聚硅氧烷	—	—	16	56	44	65	41	5	—
UCON 50-HB-280X	聚亚烷基丙二醇 50-HB 280X	0	200	177	362	227	351	302	34	M,C
UCON 50 HB-600	聚亚烷基丙二醇 50-HB 660	0	200	193	380	241	376	321	36	M
UCON 50-HB-1800X	聚亚烷基丙二醇 50-HB 1800X	0	200	123	275	161	249	212	21	M
UCON 50-HB 2000	聚亚烷基丙二醇 50-HB 2000	0	200	202	394	253	392	341	37	M,C
UCON 50-HB-3520	聚亚烷基丙二醇 50-HB 3520	0	200	198	381	241	379	323	36	M
UCON 50-HB-5100	聚亚烷基丙二醇 50 HB 5100	0	200	214	418	278	421	375	40	M,C
UCON 75 H 90000	聚丙二醇-1,2	0	200	255	452	299	470	406	45	M
UCON LB 550 X	聚丙二醇 LB-550-X	0	200	118	271	158	243	206	24	M
UCON LB 1715	聚丙二醇 LB 1715	0	200	132	297	180	275	235	27	M
UCON LB-1800-X		0	200	123	275	161	249	212	26	M
UC W982	乙烯基甲基硅橡胶	80	300	16	55	45	66	42	5	M,C
Versamid 930	聚酰胺树脂 930	115	150	109	313	144	211	209	23	B,C
Versamid 940	聚酰胺树脂 940	110	200	109	314	145	212	209	23	B,C
Versilube F 50	聚甲基氯苯基硅氧烷 F50	0	250	19	57	48	69	47	7	C
XE-60	氰乙基甲基硅橡胶 XE 60	0	250	204	381	340	493	367	42	A
XF-1150	氰乙基甲基硅油 XF 1150	0	150	308	520	470	669	528	59	A
Zinc stearate	硬脂酸锌	50	150	61	231	59	98	544	24	B,C
Zonyl E-7	苯均四酸氟代烷基酯	0	200	223	359	468	549	465	49	A
Zonyl E-91	樟脑酸氟代烷基酯	0	200	130	250	320	377	293	33	—

表 5-48 固定液 McReynolds 常数表(按 CP 值大小排序)

固定液	说明	使用温度/℃		McReynolds 常数					溶剂	CP 值
		最低	最高	X′	Y′	Z′	U′	S′		
Apiezon T	饱和烃润滑脂	—	—	41		30	55	82	T	—
Carbowax 400	聚乙二醇 400	20	100	333	653	405	—	—	A,C	—
Sorbitol	山梨糖醇	100	150	232	582	313	—	—	M	—
SP-216	甲基硅油 SP-216	0	200	632	815	733	1000	—	—	—
Squalane	角鲨烷	20	120	0	0	0	0	0	T,C	0
n Hexatriacontane	三十六烷	20	50	12	2	−3	1	11	T,B	1
Nujol	矿物油	20	100	9	5	2	6	11	T	1
Apolane-87	八十七烷	35	260	21	10	3	12	35	T	2
Convoil 20	邻苯二甲酸二癸酯	25	175	14	14	8	17	21	A,C	2
Apiezon L	饱和烃润滑脂	50	250	32	22	15	32	42	T	3
Apiezon M	饱和烃润滑脂	50	300	31	22	15	30	40	T	3
Montan wax	褐煤蜡	—	—	19	58	14	21	47	C	4
Polybutene 32	聚丁烯 32	—	—	21	29	24	42	40	—	4
Polybutene 128	聚丁烯 128	—	—	25	26	25	11	42	—	4
Apiezon J	饱和烃润滑脂	20	250	38	36	27	49	57	T	5
Apiezon N	饱和烃润滑脂	50	300	38	40	28	52	58	T	5
DC 200	甲基硅油 DC 200	0	250	16	57	45	66	43	T,C	5

续表

固定液	说明	使用温度/°C		McReynolds 常数					溶剂	CP 值
		最低	最高	X'	Y'	Z'	U'	S'		
DC 330	甲基硅油 DC 330			13	51	42	61	36	—	5
E-301	甲基硅橡胶 E-301	50	350	15	56	44	66	40	T	5
OV-1	甲基硅橡胶 OV 1	100	350	16	55	44	65	42	T,C	5
OV-101	甲基硅油 OV-101	0	350	17	57	45	67	43	C,T	5
SE 30	甲基硅橡胶 SE-30	50	300	15	53	44	64	41	T,C	5
SE 31	聚甲基乙烯基硅氧烷 SE-31	50	300	16	54	45	65	43	—	5
SE 33	聚甲基乙烯基硅氧烷 SE-33	50	300	17	54	45	67	42	—	5
SF 96	甲基硅酮 SF-96	0	250	12	53	42	61	37	T,C	5
SP-2100	甲基聚硅氧烷 SP-2100	0	350	17	57	45	67	43	C	5
UC W 982	乙烯基甲基硅橡胶	80	300	16	55	45	66	42	M,C	5
UC L46	甲基聚硅氧烷	—	—	16	56	44	65	41	—	5
DC 410	甲基硅橡胶 DC-410	50	300	18	57	47	68	44	A	6
DC 11	甲基硅脂 DC 11	30	300	17	86	48	69	56	T,C	7
DC 510	苯基甲基聚硅氧烷 DC-510	—	—	25	65	60	89	57	T	7
Versilube F-50	聚甲基氯苯基硅氧烷 F50	0	250	19	57	48	69	47	C	7
DC 560	对氯苯基甲基聚硅氧烷 DC-560	0	270	32	72	70	100	68	T	8
SE 52	含苯基的聚甲基硅氧烷 SE-52	50	300	32	72	65	98	67	T,C	8
SE 54	聚甲基苯基乙烯基硅氧烷 SE-54	50	300	33	72	66	99	67	T,C	8
SP-400	对氯苯基甲基聚硅氧烷 SP-400	0	270	32	72	70	100	68	T	8
Butyl stearate	硬脂酸丁酯	—	—	41	109	65	112	71	E,Ec	9
DC 556	苯基甲基聚硅氧烷 DC 556	—	—	37	77	80	118	79	T	9
Beeswax	蜂蜡	·	200	43	110	61	88	122	C	10
OV-3	苯基甲基聚硅氧烷 OV-3	0	350	44	86	81	124	88	T,C	10
OV-73	苯基甲基聚硅氧烷 OV-73	0	325	40	86	76	114	85	T	10
Dexsil 300(carborane-methyl silicone)	聚碳硼烷硅氧烷	40	400	47	80	103	148	96	C	11
Halocarbon Oil 10-25	卤碳油 10-25	30	100	47	70	108	133	111	C	11
Halocarbon Oil K-352	卤碳油 K-352	0	250	47	70	73	238	146	C	11
OV-105	氰丙基甲基聚硅氧烷 OV-105	0	275	36	108	93	139	86	A	11
Apiezon H	饱和烃润滑脂	20	250	59	86	81	151	129	T	12
Butoxyethyl stearate	硬脂酸丁氧基乙酯	—	—	56	135	83	136	97	—	12
Fluorolube HG 1200	聚全氟氯代烯 HG 1200	50	200	51	68	114	144	118	A	12
Halocarbon wax	卤碳蜡	50	150	55	71	116	143	123	A	12
Kel-F wax	聚三氟氯乙烯蜡	—	200	55	67	114	143	116	C	12
OV-7	苯基甲基聚硅氧烷 OV-7	0	350	69	113	111	171	128	T,C	14
DC 550	苯基甲基聚硅氧烷 DC 550	0	250	81	124	124	189	145	T,A	15
Di(2-ethylhexyl) sebacate	癸二酸二(2-乙基己基)酯	0	125	72	168	108	180	125	A,C	15

续表

固定液	说明	使用温度/℃		McReynolds 常数					溶剂	CP 值
		最低	最高	X'	Y'	Z'	U'	S'		
Dinonyl sebacate	癸二酸二壬酯	0	125	66	166	107	178	118	A	15
Dioctyl sebacate	癸二酸二辛酯	0	125	72	168	108	180	123	A,C	15
Octoil S	癸二酸二异辛酯	—	130	72	167	107	179	123	A,C	15
Celanese ester No. 9	丙烷三壬酸三甲酯	20	200	84	182	122	122	143	A,C	16
DC 702	苯基甲基聚硅氧烷 DC-702	0	225	77	124	126	189	142	C	16
DC 703	九甲基三苯基五硅氧烷 DC-703	—	225	76	123	126	189	140	C	16
Diisodecyl adipate	己二酸二异癸酯	0	150	71	171	113	185	123	M,A	16
Di (2 ethylhexyl) tetrachlorophthalate	四氯邻苯二甲酸二(2乙基己基)酯	0	150	109	132	113	171	168	A,D	16
Ditridecyl phthalate	邻苯二甲酸二(十三烷基)酯	—	-	75	156	122	195	140	A	16
Bis (2-ethylhexyl) tetrachlorophthalate	二(2-乙基己基)四氯邻苯二甲酸酯	0	150	112	150	123	168	181	A	17
Diethylene glycol stearate (DEG)	聚二乙二醇硬脂酸酯		175	64	193	106	143	191	C	17
Dilauryl phthalate	邻苯二甲酸二月桂酯	-	150	79	153	120	192	158	A,C	17
Diisooctyl adipate	己二酸二异辛酯	0	125	76	181	121	197	134	M	17
Octyl Decyl adipate	己二酸辛癸酯	--	125	79	179	119	193	134	A	17
SP-1200		25	200	67	170	103	203	166	C	17
Trimethyl propanetripelargonate	三壬酸三羟甲基丙烷酯	20	200	84	182	122	197	143	A,C	17
Diisodecyl phthalate	邻苯二甲酸二异癸酯	0	150	84	173	137	218	155	M,A	18
OV-11	苯基甲基聚硅氧烷 OV-11	0	350	102	142	145	219	178	T,C	18
OV-61	苯基甲基聚硅氧烷 OV-61	0	350	101	143	142	213	174	T,C	18
Dinonyl phthalate	邻苯二甲酸二壬酯	20	150	83	183	147	231	159	D,A	19
OV-1701	氰丙基苯基乙烯基甲基聚硅氧烷 OV-1701	20	300	67	170	153	228	171	A	19
Triton X-400	聚乙二醇辛基苯基醚	---	—	68	334	97	176	131	-	19
DC 710	苯基甲基聚硅氧烷 DC-710	0	250	107	149	153	228	190	A	20
Dexsil 400(carborane-phenyl silicone)	聚碳硼烷硅氧烷	50	370	59	114	140	187	173	C	20
Dexsil 410(carborane-nitrile silicone)	聚碳硼烷硅氧烷	50	360	85	165	169	242	180	C	20
Diisoctyl phthalate	邻苯二甲酸二异辛酯	0	150	94	193	154	243	174	M,A	20
Dioctyl phthalate	邻苯二甲酸二辛酯	0	150	92	186	150	236	167	M,A	20
Hallcomid M-18	N,N 二甲基油酸酰胺 M18	40	150	79	268	130	222	146	C	20
Poly-I 110	聚酰胺	90	275	115	194	122	204	202	C	20
Tri (2-ethylhexyl) phosphate	磷酸三(2-乙基己基酯)	20	150	71	288	117	215	132	M	20
Butyloctyl phthalate	邻苯二甲酸丁辛酯	—	—	97	194	157	246	174	M,D	21
SP-2250	苯基甲基聚硅氧烷 SP-2250	0	375	119	158	162	243	202	C,T	21
OV-17	苯基甲基聚硅氧烷 OV-17	0	375	119	158	162	243	202	T,C	21
Hallcomid M-18 OL	N,N-二甲基油酸酰胺 M-18 OL	30	150	89	230	143	239	165	M,C	22
Flexol 8N8	N,N-二(2-乙基己酸乙酯)替-2乙基己酸酰胺	20	190	96	254	164	260	179	D,C	23
Hercoflex 600	聚1,3-丙二醇癸二酸酯	20	200	112	234	168	261	194	C	23

续表

固 定 液	说 明	使用温度/℃		McReynolds 常数					溶剂	CP 值
		最低	最高	X′	Y′	Z′	U′	S′		
SP 392	苯基甲基聚硅氧烷 SP 392	20	200	133	169	176	258	219	—	23
Span 60	脱水山梨糖醇单硬脂酸酯	15	150	88	263	158	200	258	M,C	23
Versamid 930	聚酰胺树脂 930	115	150	109	313	144	211	209	B,C	23
Versamid 940	聚酰胺树脂 940	110	200	109	314	145	212	209	B,C	23
Castorwax	蓖麻蜡	—	—	108	265	175	229	216	—	24
Span 80	脱水山梨糖醇单油酸酯	25	150	97	266	170	216	268	T	24
UCON 50-HB 1800X	聚亚烷基丙二醇 50 HB 1800X	0	200	123	275	161	249	212	M	24
UCON LB-550-X	聚丙二醇 LB 550 X	0	200	118	271	158	243	206	M	24
Zinc stearate	硬脂酸锌	50	150	61	231	59	98	544	B,C	24
OV-22	苯基甲基聚硅氧烷 OV-22	0	350	160	188	191	283	253	C,A	25
Poly-A 103	聚酰胺	70	275	115	331	149	263	214	C	25
AT 220	—	0	180	117	380	181	293	133	C	26
Atpet 200				108	282	186	235	289		26
Estynox 100	环氧增塑剂	0	175	136	257	182	285	227	C	26
Poly -A 101A	聚酰胺	50	275	115	357	151	262	214	C	26
Polypropylene glycol 2000(PPG 2000)	聚丙二醇 2000	20	180	128	294	173	264	226	C	26
Trimer acid	C_{54}三羧酸	20	150	94	271	163	182	378	C	26
Triton X-200	聚乙二醇辛基苯基醚	—	—	117	289	172	266	237	A	26
UCON LB-1800 X	--	0	200	123	275	161	249	212	M	26
Acetyltributyl citrate	柠檬酸乙酰三丁酯	20	180	135	268	202	314	233	A	27
Di-(2 butoxyethyl) adipate	己二酸二丁氧基乙酯	20		137	278	198	300	235	D	27
Didecyl phthalate	邻苯二甲酸二癸酯	50	150	136	255	213	320	235	A	27
Di (2-ethylhexyl) phthalate	邻苯二甲酸二(2-乙基己基)酯	—	150	135	254	213	320	235	D,M	27
UCON LB 1715	聚丙二醇 LB 1715	0	200	132	297	180	275	235	M	27
Dicyclohexyl phthalate	邻苯二甲酸二环己酯	—	—	146	257	206	316	245	—	28
Elastex 50-B	乳化沥青 50 B	—	—	140	255	209	318	239	—	28
OV-25	苯基甲基聚硅氧烷 OV-25	0	350	178	204	208	305	280	A,C	28
Pluronic L81	聚(乙二醇-丙二醇)	—	—	144	314	187	289	249	—	28
OS 124	聚间苯醚 OS 124	0	200	176	227	224	306	283	T	29
Polypropyleneimine	聚丙烯亚胺	0	200	122	425	168	263	224	C	29
Polyphenyl ether (5 ring) OS-124	聚苯醚(五环)	20	200	176	227	224	306	283	C,T	29
Tributyl citrate	柠檬酸三丁酯	—	150	135	236	213	324	262	M	29
Di (2-ethoxyethyl) sebacate	癸二酸二乙氧基乙酯	—	150	151	306	211	320	274	A	30
OS 138	聚间苯醚 OS 138	0	200	182	233	228	313	293	T	30
Polyphenyl ether (6 ring) OS-138	聚苯醚(六环)	20	250	182	233	228	313	293	C,T	30
Di-(2 butoxyethyl) phthalate	邻苯二甲酸二丁氧基乙酯	20	175	157	292	233	348	272	C,M	31
Poly A 135	—	70	250	163	389	168	340	269	C	32
Tributoxyethyl phosphate	磷酸三丁氧基乙酯	20	125	141	373	209	341	274	M	32
Neopentyl glycol sebacate	聚新戊二醇癸二酸酯	50	225	172	327	225	344	326	C	33
Squalene	角鲨烯	0	100	152	341	238	329	344	C,T	33
Zonyl E-91	樟脑酸氟代烷基酯	0	200	130	250	320	377	293	—	33

续表

固定液	说明	使用温度/℃		McReynolds 常数					溶剂	CP值
		最低	最高	X'	Y'	Z'	U'	S'		
Paraplex G 25	聚丙二醇癸二酸酯 G 25	-	-	189	328	239	368	312	—	34
Polytergent J 300	卤碳蜡	50	150	168	366	227	350	308	A	34
SP 525	"芳烃"SP-525	60	270	225	255	253	368	320	T	34
Sucrose acetate isobutyrate (SAIB)	乙酰蔗糖异丁酸酯	30	200	172	330	251	378	295	T,C	34
Tricresyl phosphate	磷酸三甲苯酯	20	125	176	321	250	374	299	M,C	34
UCON 50 HB 280X	聚亚烷基丙二醇 50-HB 280X	0	200	177	362	227	351	302	M,C	34
Ethomeen 18/25	十八碳酰胺与环氧乙烷的缩合物	—	—	176	382	230	353	323	—	35
Polytergent J-400	卤碳蜡	50	150	180	375	234	366	317	A	35
Ethofat 60/25	聚乙二醇单硬脂酸酯	50	175	191	382	244	380	333	C	36
Ethomeen S/25	大豆脂肪胺与环氧乙烷缩合物	—	75	186	395	242	370	339	C	36
OV 202	三氟丙基甲基聚硅氧烷 OV-202	0	275	146	238	358	468	310	C	36
OV 210	三氟丙基甲基聚硅氧烷 OV 210	0	275	146	238	358	468	310	C,A	36
QF-1	三氟丙基甲基聚硅氧烷 QF-1	50	200	144	233	355	463	305	C,A	36
SP 2401	三氟丙基甲基聚硅氧烷 SP-2401	0	275	146	238	358	468	310	A	36
UCON 50 HB 660	聚亚烷基丙二醇 50-HB 660	0	200	193	380	241	376	321	M	36
UCON 50-HB-3520	聚亚烷基丙二醇 50-HB 3520	0	210	198	381	241	379	323	M	36
Igepal CO-630	聚乙二醇壬基苯基醚 CO 630	30	200	192	381	253	382	344	C	37
LSX 3 0295	聚氟代烷基硅氧烷	-	250	152	241	366	479	319		37
OV-215	三氟丙基乙烯基甲基聚硅氧烷 OV-215	0	275	149	240	363	478	315	E,C	37
Pluronic P65	聚(乙二醇-丙二醇)			203	394	251	393	340		37
Pluronic P85	聚(乙二醇-丙二醇)	—	—	201	390	247	388	335	—	37
Tergitol NPX	聚乙二醇的壬基苯基醚	100	200	197	386	258	389	351	A,C	37
UCON 50-HB-2000	聚亚烷基丙二醇 50 HB 2000	0	200	202	394	253	392	341	M,C	37
Cresyl diphenyl phosphate	磷酸-甲苯基二苯酯	20	125	199	351	285	413	336	B,C	38
Emulphor ON-870	聚乙二醇十八醚	40	200	202	395	251	395	344	M,C	38
Pluronic L35	聚(乙二醇-丙二醇)	—	—	206	406	257	398	349	—	38
Polytergent B-350	卤碳蜡	—	—	202	392	260	395	353	—	38
Igepal CO-710	聚乙二醇壬基苯基醚 CO-710	—	—	205	397	266	401	361	C	39
Polyglycol 15-200	聚乙二醇 15-200	—	—	207	410	262	401	354	—	39
Polytergent G 300	卤碳蜡	—	—	203	398	267	401	360	—	39
Triton X-100	聚乙二醇辛基苯基醚	50	200	203	397	268	402	362	M,A	39
Di-(2-ethoxyethyl) phthalate	邻苯二甲酸二乙氧基乙酯	—	—	214	375	305	446	364	—	40
OV-330	聚二醇醚	0	250	222	391	273	417	368	A,T	40
UCON 50-HB 5100	聚烷撑丙二醇 50-HB 5100	0	200	214	418	278	421	375	M,C	40

续表

固定液	说明	使用温度/°C		McReynolds 常数					溶剂	CP 值
		最低	最高	X'	Y'	Z'	U''	S'		
Igepal CO-730	聚乙二醇壬基苯基醚 CO-730	—	—	224	418	279	428	379	C	41
Renex 678	聚环氧乙烷基芳基醚	—	—	223	417	278	427	381	—	41
Siponate DS-10	十二烷基苯磺酸钠	20	200	99	569	320	344	388	A,C	41
Tween 80	聚环氧乙烷山梨醇单油酸酯	0	160	227	430	283	138	396	M	42
XE-60	氰乙基甲基硅橡胶 XE 60	0	250	204	381	340	493	367	A	42
Bis (2 ethoxyethoxyethyl) phthalate	二(乙氧基乙氧基乙基)邻苯二甲酸酯	—	150	233	408	317	470	389	A,C	43
OV-225	氰丙基苯基甲基聚硅氧烷 OV 225	0	275	228	369	338	492	386	A	43
Superox 4	聚乙二醇分子量 40 万	80	250	296	568	349	555	470	C	43
Ethylene glycol tetrachlorophthalate	聚乙二醇四氯邻苯二甲酸酯	100	200	307	345	318	428	466	C	44
Neopentyl glycol adipate	聚新戊二醇己二酸酯	50	225	234	425	312	462	438	C	44
UCON 75 H 90000	聚丙二醇 1,2	0	200	255	452	299	470	406	M	45
Igepal CO 880	聚乙二醇壬基苯基醚 CO 880	100	200	259	461	311	482	426	A,C	46
Pluronic F68	聚(乙二醇-丙二醇)	—	—	264	465	309	488	423	—	46
Pluronic F88	聚(乙二醇-丙二醇)			262	461	306	483	419	—	46
Surfonic N 300	壬基酚与环氧乙烷加合物	100	200	261	462	313	484	427	A,C	46
Triton X-305	聚乙二醇辛基苯基醚	40	200	262	467	314	488	430	M	46
Cyclohexanedimethanol succinate	环己烷二甲醇丁二酸酯	100	250	269	446	328	493	481	C	48
Paraplex G-40	聚丙二醇己二酸酯 G 40	—	—	282	459	355	528	457		49
Zonyl E-7	苯均四酸氟代烷基酯	0	200	223	359	468	549	465	A	49
Carbowax 4000 monostearate	聚乙二醇 4000 单硬脂酸酯	60	200	282	496	331	517	467	C	50
Neopentyl glycol succinate	聚新戊二醇丁二酸酯	50	225	272	469	366	539	474	C	50
Quadrol	N,N,N',N'-四(2-羟丙基)乙二胺	0	150	214	571	357	472	489	C	50
Igepal CO 990	聚乙二醇壬基苯基醚 CO-990	100	220	298	508	345	540	475	A	51
Polyethylene Imine	聚乙烯亚胺	0	180	322	800	17	573	524	M,A	53
Carbowax 20M-TPA (terephthalic acid)	聚乙二醇 20M TPA	60	250	321	537	367	573	520	C,D	54
EGSP-Z	乙二醇丁二酸酯/苯基甲基硅氧烷共聚物	50	230	308	474	399	548	549	C	54
Carbowax 6000	聚乙二醇 6000	60	200	322	540	369	577	512	C	55
Carbowax 20M	聚乙二醇 20M	60	250	322	536	368	572	510	C	55
Epon 1001	环氧树脂 Epon 1001	50	200	284	489	406	539	601	C	55
Superox 20M	聚乙二醇分子量 2 万	60	250	321	540	365	572	511	C,M	55
Carbowax 3350	聚乙二醇 3350	60	200	317	545	378	578	521	C	56
Polyethylene glycol 4000	聚乙二醇 4000	60	120	325	551	375	582	520	C	56
OV-351	聚乙二醇 20M 与硝基对苯二甲酸反应物	60	275	335	552	382	583	540	C	57
Polyethylene glycol adipate	聚乙二醇己二酸酯	—	—	371	579	454	355	633	—	57

续表

固定液	说明	使用温度/°C		McReynolds 常数					溶剂	CP 值
		最低	最高	X'	Y'	Z'	U'	S'		
SP-1000	聚乙二醇 20M 与硝基对苯二甲酸反应物	60	275	332	555	393	583	546	C	57
SP 2300	氰丙基苯基甲基聚硅氧烷 SP-2300	50	275	322	480	446	636	524	A,C	57
Ethylene glycol isophthalate	聚乙二醇间苯二甲酸酯	100	200	326	508	425	607	561	C	58
Silar 5CP	氰丙基苯基甲基聚硅氧烷	50	275	319	495	446	637	531	A,C	58
XF-1150	氰乙基甲基硅油 XF 1150	0	150	308	520	470	669	528	A	59
Free fatty acid phase (FFAP)	聚乙二醇 20M 与 2 硝基对苯二甲酸的反应产物	50	275	340	580	397	602	627	C	60
Sorbitol hexaacetate	山梨糖醇六乙酸酯	—	—	335	553	449	652	543	—	60
Carbowax 1000	聚乙二醇 1000	40	150	347	607	418	626	589	A,C	61
STAP	聚乙二醇 20M 与对苯二甲酸的反应产物	100	225	345	586	400	610	627	—	61
Sucrose octaacetate	蔗糖八乙酸酯	—	>200	344	570	461	671	569	E	62
Butanediol succinate	聚丁二醇丁二酸酯	50	230	370	571	448	657	611	D,C	63
Carbowax 600	聚乙二醇 600	30	120	323	583	382			A,C	63
Ethylene glycol adipate (EGA)	聚乙二醇己二酸酯	100	200	372	576	453	655	617	C,A	63
Polyethylene glycol 600	聚乙二醇 600	30	120	350	631	428	632	605	A,C	63
LAC 1-R-296	聚二乙二醇己二酸酯	20	210	377	601	458	663	655	A	65
Phenyldiethanolamine succinate	聚苯基二乙醇胺丁二酸酯	20	230	386	555	472	674	654	A,C	65
Reoplex 400	聚丙二醇己二酸酯 400	50	210	364	619	449	647	671	C	65
Carbowax 1450	聚乙二醇 1450	50	175	371	639	453	666	641	C	66
Diethylene glycol adipate (DEGA)	聚二乙二醇己二酸酯	20	210	378	603	460	665	658	A,C	66
Resoflex R 296	聚丙二醇己二酸酯 R296	50	210	380	609	463	668	667	C	66
EGSS-Y	乙二醇丁二酸酯/甲基硅氧烷共聚物	100	230	391	597	493	693	661	C	67
LAC 2-R-446	聚二乙二醇己二酸季戊四醇交联聚酯	20	200	387	616	471	679	667	A	67
Hyprose SP-80	八(2 羟丙基)蔗糖	20	200	336	742	492	639	727	C,M	70
ECNSS-M	乙二醇丁二酸/氰乙基硅氧烷共聚物	30	180	421	890	581	803	732	C	76
Silar 7CP	氰丙基苯基甲基聚硅氧烷	50	275	440	638	605	844	673	A,C	76
SP 2310	氰丙基苯基甲基聚硅氧烷 SP 2310	50	275	440	637	605	840	670	C,A	76
Diglycerol	双甘油	20	150	371	826	560	676	854	C,M	78
EGSS X	乙二醇丁二酸酯/甲基硅氧烷共聚物	90	200	484	710	585	831	778	C	80
Diethylene glycol succinate (DEGS)	聚二乙二醇丁二酸酯	20	200	496	746	590	837	835	A,C	81
Ethylene glycol phthalate	聚乙二醇邻苯二甲酸酯	100	200	453	697	602	816	872	—	82
LAC 3-R 728	聚二乙二醇丁二酸酯	20	200	502	755	597	849	852	A	84
Silar 9CP	氰丙基苯基甲基聚硅氧烷	50	275	489	725	631	913	778	A,C	84

续表

固定液	说明	使用温度/℃		McReynolds 常数					溶剂	CP 值
		最低	最高	X'	Y'	Z'	U'	S'		
SP 2330	氰丙基苯基甲基聚硅氧烷 SP 2330	50	275	490	725	630	913	778	A,A	84
Silar 10C	氰丙基甲基聚硅氧烷	50	275	523	757	659	942	801	A,C	87
SP-2320	氰丙基苯基甲基聚硅氧烷 SP-2320	50	270	523	757	659	942	801	A	87
SP-2340	氰丙基聚硅氧烷 SP-2340	50	275	520	757	659	942	800	A,C	88
Tetrahydroxyethylenediamine(THEED)	N,N,N',N'-四(2-羟乙基)乙二胺	20	120	463	942	626	801	893	M	88
Ethylene glycol succinate(EGS)	聚乙二醇丁二酸酯	100	200	537	787	643	903	889	C	89
Tetracyanoethylated pentaerythritol	四氰乙基季戊四醇 PE	30	175	526	782	677	920	837	T	89
1,2,3,4,5,6 Hexakis (2 cyanoethoxy)-cyclohexane	六(氰乙氧基)环己烷	125	200	567	825	713	978	901	T,C	94
SP-216	甲基硅油 SP 216	25	200	632	875	733	1000	680	A	94
1,2,3-Tris(2-cyanoethoxy) propane (TCEP)	1,2,3-三(2-氰乙氧基)丙烷	20	180	593	857	752	1028	915	M,C	98
OV-275	氰乙基氰丙基甲基聚硅氧烷 OV 275	25	250	629	872	763	1106	849	C,A	100
1,2,3,4-Tetrakis (2-cyanoethoxy) butane	1,2,3,4-四(2-氰乙氧基)丁烷	110	200	617	860	773	1048	941	C	101
Cyanoethyl sucrose	氰乙基蔗糖	—	—	647	919	797	1043	976	—	104
N,N-Bis-(2-cyanoethyl) formamide	N,N-双(2-氰乙基)甲酰胺	20	125	690	991	853	1110	1000	M,C	110

（三）固定液选择性相似程度

Rotzsche[12]曾将诸多的固定液依其选择性的相似程度分成 36 组，部分如表 5-49 所示。表 5-50 中列出了不能归入这 36 组之中的固定液，可以给人们在选用固定液时一些启示。

表 5-49　固定液选择性相似程度分类

分类	固定液	McReynolds 常数平均值
1	角鲨烷；邻苯二甲酸二癸酯；正十六烷；Nujol；石蜡油	$X'=9.20$；$Y'=5.40$；$Z'=1.80$；$U'=6.20$；$S'=11.20$
2	Apiezon L，M，N；聚丁烯 32，聚丁烯 128；OV 1，OV-101；UC W 982；ASI (100% Methyl)；DC-200/MS-200；DC-300；DC-400；DC-401；DC-430；E-300；E-301；聚二甲基硅油，硅脂；JXR；UC L-45；UC L-46；SE 30；SF-96；SP-2100	$X'=18.08$；$Y'=51.48$；$Z'=41.13$；$U'=61.75$；$S'=42.63$
3	DC-560；DC-11；DC 510；E-350；E-351；SE-52；SE 54；F60；F61	$X'=28.50$；$Y'=74.10$；$Z'=62.80$；$U'=91.90$；$S'=64.10$
4	DC-556；OV-3	$X'=40.50$；$Y'=81.50$；$Z'=80.50$；$U'=120.00$；$S'=83.50$
5	Halocarbon Wax；Kel-F Wax；Fluorolube HG 1200；Halocarbon 10-25；Dexsil 300	$X'=49.00$；$Y'=70.80$；$Z'=113.00$；$U'=143.40$；$S'=117.00$
6	DC-550；DC-702；DC-703；OV-7；Dexsil 400（苯基）	$X'=75.00$；$Y'=119.67$；$Z'=116.17$；$U'=175.00$；$S'=137.00$

续表

分类	固　定　液	McReynolds 常数平均值
7	Octoil S；己二酸二(2-乙基己基)酯；癸二酸二(2-乙基己基)酯；邻苯二甲酸二(十一烷基)酯；己二酸二异癸酯；邻苯二甲酸二异癸酯；己二酸二异壬酯；己二酸二异辛酯；癸二酸二壬酯；癸二酸二辛酯；邻苯二甲酸二(十三烷基)酯；己二酸辛基癸基酯	$X'=75.46$；$Y'=171.54$；$Z'=117.38$；$U'=194.31$；$S'=134.62$
8	双(2-乙基己基)邻苯二甲酸酯；邻苯二甲酸丁基辛基酯；邻苯二甲酸二异辛酯；邻苯二甲酸二壬酯；邻苯二甲酸二辛酯；Flexol GPE	$X'=91.83$；$Y'=192.00$；$Z'=149.67$；$U'=236.00$；$S'=167.17$
9	磷酸三乙基己基酯；Hallcomid M-18；Hallcomid M 18 OL	$X'=79.67$；$Y'=278.67$；$Z'=130.00$；$U'=225.33$；$S'=147.67$
10	ASI (50%Phenyl)；DC 710；OV-11；OV-17；SP 392；SP 2250	$X'=116.50$；$Y'=155.67$；$Z'=160.00$；$U'=239.00$；$S'=198.83$
11	Flexol 8N8；Hercoflex	$X'=104.00$；$Y'=244.00$；$Z'=166.00$；$U'=260.50$；$S'=186.50$
12	Versamid 930；Versamid 940；Polyamide	$X'=108.67$；$Y'=312.00$；$Z'=166.00$；$U'=210.33$；$S'=208.33$
13	Castorwax；Atpet 200；Span 60；Span 80	$X'=100.25$；$Y'=269.00$；$Z'=172.25$；$U'=220.00$；$S'=265.25$
14	OV-22；Mer-35	$X'=161.00$；$Y'=194.00$；$Z'=184.50$；$U'=275.50$；$S'=254.50$
15	PPG 1000；PPG 2000；Pluracol P-2010；Pluronic L-81；Ucon 50-HB-1800X；Ucon LB-550X；Flexol B-400；Triton X-200	$X'=126.38$；$Y'=292.00$；$Z'=172.38$；$U'=264.13$；$S'=227.13$
16	双(2-丁氧基乙基)己二酸酯；邻苯二甲酸二环己基酯；邻苯二甲酸二癸酯；乙酰基柠檬酸三丁酯；Estynox；Elastex 50-B	$X'=138.33$；$Y'=261.69$；$Z'=201.67$；$U'=308.83$；$S'=235.67$
17	OS 124；OS 138；OV-25；SR 119	$X'=175.50$；$Y'=225.50$；$Z'=220.25$；$U'=309.50$；$S'=288.75$
18	Polytergent J-300；Polytergent J-400；Ucon 50-HB-280X；Ethomeen 18/25	$X'=175.25$；$Y'=371.25$；$Z'=229.50$；$U'=355.00$；$S'=312.50$
19	乙酰蔗糖异丁酸酯；磷酸三甲苯酯；新戊二醇癸二酸酯；HI-EFF 3CP；Paraplex G-25；聚丙二醇癸二酸酯	$X'=181.00$；$Y'=330.20$；$Z'=243.20$；$U'=369.00$；$S'=312.00$
20	FS 1265；LSX-3-0295；OV-210；ASI 50 Trifluoropropyl	$X'=147.00$；$Y'=237.50$；$Z'=359.25$；$U'=469.50$；$S'=311.00$
21	Emulphor ON-870；Ethofat 60/25；Igepal CO-630；Igepal CO-710；Polytergent B-350；Polytergent G-300；Tergitol NPX 728；Triton X-100；Pluronic L-35；Pluronic P-65；Pluronic P-85；Polyglycol 15-200；Ucon 50-HB-660；Ucon 50-HB-2000；Ucon 50-HB-3520；Ethomeen S-25；Oronite NI-W	$X'=198.59$；$Y'=391.18$；$Z'=253.12$；$U'=388.94$；$S'=343.35$
22	Igepal CO-730；Renex 678；Lutensol；Ucon 50-HB-5100；Tween 80	$X'=224.00$；$Y'=421.60$；$Z'=282.20$；$U'=430.40$；$S'=383.40$
23	ASI (25%Phenyl 25%Cyanopropyl)；OV 25；XE 60；XF-1125	$X'=216.00$；$Y'=375.00$；$Z'=339.00$；$U'=492.50$；$S'=376.50$
24	聚乙二醇400单硬脂酸酯；Igepal CO-880；Surfonic N-300；Triton X 305；Pluronic F 68；Pluronic F-88；Ucon75-H-90000	$X'=263.29$；$Y'=464.86$；$Z'=311.00$；$U'=486.71$；$S'=425.72$

续表

分类	固定液	McReynolds 常数平均值
25	聚新戊二醇丁二酸酯；HI-EFF 3 BP；Paraplex G-40	$X'=275.00$；$Y'=466.75$；$Z'=363.25$；$U'=537.25$；$S'=473.00$
26	聚乙二醇 4000；聚乙二醇 6000；MER-21；聚乙二醇 20M；聚乙二醇 20M-TPA；SP1000	$X'=323.00$；$Y'=543.57$；$Z'=374.29$；$U'=577.14$；$S'=520.14$
27	ASI (50% Cyanopropyl)；Silar 5CP；SP 2300	$X'=319.00$；$Y'=495.00$；$Z'=446.00$；$U'=637.00$；$S'=530.33$
28	FFAP；STAP	$X'=342.50$；$Y'=583.00$；$Z'=398.50$；$U'=606.00$；$S'=627.00$
29	聚乙二醇 600；聚乙二醇 1000	$X'=348.50$；$Y'=619.00$；$Z'=423.00$；$U'=629.00$；$S'=597.00$
30	丁二醇丁二酸酯；HI EFF 4BP；二乙二醇己二酸酯；HI-EFF 1 AP；LAC-IR-296；乙二醇己二酸酯；HI-EFF 2 AP；苯基二乙醇胺丁二酸酯；HI EFF 10 BP	$X'=374.38$；$Y'=581.63$；$Z'=457.13$；$U'=661.00$；$S'=634.50$
31	二乙二醇己二酸酯十季戊四醇；EGSS-Y	$X'=389.00$；$Y'=606.50$；$Z'=482.00$；$U'=683.00$；$S'=664.00$
32	二乙二醇丁二酸酯；EGSS-X	$X'=488.00$；$Y'=721.00$；$Z'=583.00$；$U'=832.00$；$S'=784.50$
33	二乙二醇丁二酸酯-PS；HI-EFF-1 BP	$X'=499.00$；$Y'=750.67$；$Z'=599.33$；$U'=842.00$；$S'=849.00$
34	Silar 9CP；SP 2330	$X'=489.00$；$Y'=725.00$；$Z'=630.50$；$U'=913.00$；$S'=778.00$
35	Silar 10C；SP 2340	$X'=521.00$；$Y'=756.00$；$Z'=659.00$；$U'=942.00$；$S'=800.50$
36	乙二醇丁二酸酯；HI-EFF-2 BP	$X'=536.50$；$Y'=781.00$；$Z'=639.50$；$U'=900.00$；$S'=876.50$

表 5-50 不能归入表 5-49 分类的固定液

沥青；N，N 二甲基 γ 氨基乙氧基甲基聚硅氧烷；硬脂酸丁酯；蜂蜡；Pentasil 350；OV-105；Apiezon H；硬脂酸丁氧基乙酯；Halocarbon K-352；四氯邻苯二甲酸双（2 乙基己基）酯；二硬脂酸二乙二醇酯；SP 1200；OV 61；Triton X 400；Poly I 110；Dexsil 400 (2-氰乙基)；硬脂酸锌；Ucon LB 1715；Poly-A 103；C_{54}三羧酸；Poly-A 101A；Amine 220；聚丙烯亚胺；癸二酸双（2-乙氧基乙基）酯；邻苯二甲酸双（2-丁氧基乙基）酯；Poly-A 135；磷酸三丁氧基乙酯；Zonyl E 91；角鲨烯；γ-氨基丙基三乙氧基硅烷；SP 525；磷酸甲苯基二苯基酯；邻苯二甲酸双（2-乙氧基乙基）酯；Siponate DS-10；γ-吗啉基丙基三甲氧基硅烷；AN-600；邻苯二甲酸双（乙氧基乙氧基乙基）酯；HI-EFF 3 AP；四氯邻苯二甲酸乙二醇酯；Zonyl E 7；N-烯丙基-γ-氨基丙基三甲氧基硅烷；N，N，N'，N'-四（2-羟丙基）乙撑二胺；Igepal CO-990；Epon 1001；XF-1150；山梨糖醇六乙酸酯；蔗糖八乙酸酯；Mer-2；聚乙二醇 1000；Reoplex-400；聚乙二醇 1540；SP2310；双甘油；THEED；四氰乙基季戊四醇；氰乙基蔗糖；N，N 双（2-氰乙基）甲酰胺；OV-275

最后应指出，文献报道的固定液使用温度常有不一致之处，其原因颇多。如，不同厂家生产固定液的工艺不同，固定液的纯度和添加的稳定剂不相同；色谱柱的柱型与制备工艺不同，空心柱有涂渍或化学交联方式、液膜厚度不同；使用的检测器不同，对噪声的要求差别，

等等。故在实际工作中，还应根据情况决定。

参 考 文 献

1 Hollis O L. Anal Chem，1966；38：309
2 Hollis O L，Hayes W V. J Gas Chem，1966；4：235
3 Supina W R. The Packed Column in Gas Chromatography. Bellefonte PA：Supelco Inc，1974
4 李浩春，卢佩章．气相色谱法．北京：科学出版社，1993
5 中国科学院化学研究所色谱组．气相色谱手册．北京：科学出版社，1977
6 顾惠祥，阎宝石．气相色谱实用手册．北京：化学工业出版社，1990
7 McReynolds W O. J Chrom Sci，1970；8：685
8 Haken J K. J Chromatogr 1972；73：419
9 Haken J K，J Chroamtogr，1977；111：247
10 Haken J K. J Chromatogr 1984；300：1
11 Itsikson L B，Berezkin V G，Haken J K. J Chromatogr 1985；331：1
12 Rotzsche H. Stationary Phases in Gas Chromatography. New York：Elsevier，1991
13 Supelco. Environmental Chromatography Products 1990；P25
14 Thompson B. Fundamemtals of Gas Analysis by Gas Chromatography. Varian 1977；P16～18
15 Supina W R，Rose L P. J Chrom Sci，1 1969；192
16 Supina W R. The Packed Column in Gas Chromatography. Supelco，1974；P46～51

（许国旺　修振佳）

第六章　色　谱　柱

第一节　填　充　柱

一、柱管的制备

（一）柱管管材

常用的填充柱管柱有玻璃管、金属管和塑料管柱等三类。

1. 玻璃管柱

现在常用硼硅玻璃管制成的玻璃管柱，管柱内壁用适当的方法洗净后就可以使用。玻璃表面有一些硅醇基团，可能对组分有些吸附性和催化性，若因之对色谱分离有碍，则将管柱最后用5％二甲基二氯硅烷的甲苯溶液浸泡数分钟，继而用甲苯、甲醇冲洗干净。

玻璃管柱的优点是化学惰性好，制备的柱子柱效高，能观察柱子的填充时情况及使用过程中柱内填充和固定相的变化情况。如果原来柱子有很好的性能，后来出现色谱峰变宽，部分填料变色，则可根据柱子使用情况作相应的调整。玻璃柱对于酸式巴比土酸盐、胺、游离酸和其他强极性化合物等分析是比较适用的。虽然玻璃柱的应用没有不锈钢柱普及，但在一般分析中玻璃柱的效果是最好的。玻璃柱的缺点是很脆，易于破碎。玻璃柱在受热以后容易发生破裂，如果把热的柱子从色谱仪中移出，由于填料的氧化作用，容易损坏柱子，所以要等色谱柱冷却后才能停止通入载气，移出色谱柱。

虽然填充玻璃柱的应用不如不锈钢柱普及，但分析农药等吸附性强的组分时，舍其则无他可用。

2. 金属管柱

曾使用过的金属管柱有不锈钢管、铜管、铝管柱，以及金、银、钛、镍管柱。后四种价昂难得，只是在极特殊情况偶尔用之；铜管和镍管柱因对许多分析组分产生较强吸附、催化，又质软易变形，渐被淘汰；唯不锈钢柱被广为使用。

使用的不锈钢管内壁要特别洗净，其方法如下：将内壁用布条擦净的不锈钢管先用10％热氢氧化钠溶液浸泡，再用水冲至中性。进一步洗涤还可以用（1＋20）稀盐酸浸泡，再冲洗至中性。

不锈钢管柱的优点是不易损坏，缺点是看不见固定相装入柱后的情况。分析脂肪酸酯和烃类化合物时用不锈钢管柱是很适宜的。对于一些强极性化合物，特别是痕量分析，就不如玻璃管柱。

3. 塑料管柱

现在通用的塑料管柱是用聚四氟乙烯作管材制成。这种管柱的优点是化学惰性最好。不能在其他管柱上进行分离的组分（如化学性质活泼的HCl、Cl_2等）就需要用它了。其缺点是水蒸气、氧和氢等低分子量气体可在150℃以上从多孔的管壁渗入，使其中固体吸附剂受损坏；另外柱效颇低，其最高使用温度不可超过260℃。

（二）柱管尺寸

有许多种柱管尺寸的规格，以适应不同样品分离目的、载体粒度、载气流量和仪器型号的要求。分析用的柱管外径有3.18、4.76、6.35mm三种；前二种内径为2mm，后一种内径为2、3、4mm。供制备用的柱管外径为（1～10）cm。长度都很少超过10m，分析柱多在3m以内。柱子的形状有U形或螺旋形，前者柱效较高。螺旋柱圈径应比柱内径大15倍，才能获得较好的柱效[1~3]。

柱管内径愈小，应填装粒度更细的固定相，才可获得更高的柱效，但柱容量随之减小，柱压降增大。表6-1列出的柱管尺寸宜选用载体粒度、载气流量的关系，可供参考。

表6-1　柱管尺寸与载体粒度及载气流量的关系

柱内径/mm	载体粒度/目		载气流量/(ml·min⁻¹)	
	柱长小于3m	柱长超过3m	N_2	H_2
2	100～120	80～100	8～15	15～30
3	100～120	80～100	15～30	30～60
4	80～100	60～80	30～60	60～100

二、固定相的制备

（一）固体固定相的制备

先将购买的固体固定相择除杂物，有些还要适当粉碎，除去粉尘（如分子筛），然后进行筛分；若需使之改性，则此时将相应的物质涂布在表面上；最后依规定的操作规程进行活化，储存即可。

（二）液体固定相的制备

应将适量的固定液均匀地涂布在载体表面上，既使固定液很好地分散，又使载体表面的活性点被掩盖。在制备时，溶解固定液的溶剂体积不宜过大，以能润湿载体为好；沸点不宜过高，以免溶剂挥发时损失了固定液；化学性质要稳定，不与固定液起任何作用（例如有文献报道[4]；QF-1、OV-210、SP-2401在丙酮中迅速分解，须用乙酸乙酯代替）。注意载体机械性能不强者，容易破碎，不仅增加消耗，而且破碎的载体还会呈现出活性点。

涂布固定液于硅藻土型和玻璃球载体的方法，有以下数种：

1. 蒸发法

用溶剂溶解已知重量的固定液，将载体以旋转方式缓慢倒入，使载体全部浸没，不可结块。缓慢让溶剂蒸发，或以红外灯烘烤。这是最常用的方法，操作简便，但易造成涂布不均匀。

2. 过滤法[5,6]

将已知量的载体装入烧结玻璃漏斗中，将涂渍液加入，通过测定过滤前后涂渍量之差可知载体中固定液含量。此法优点是涂渍均匀，载体破碎少；缺点是操作不易，不适于粘度很大的固定液。

3. 柱内涂渍法[7]

将涂渍液通过已装载体的色谱柱，再通惰性气体吹掉多余的涂渍液和溶剂。此法适于涂渍后不宜装柱的载体，例如玻璃球；缺点是难以确定涂渍量。

4. 气相涂渍法[8]

让气体先通过涂渍液，然后将气体所携带的固定液送到载体上。此法缺点较多。

5. 化学交联法[9]

用有机过氧化合物作聚合引发剂，将某些固定液化学交联于载体上。

6. 特殊柱涂渍

将固定液涂渍于聚四氟乙烯载体时，为消除静电，常把载体冷却到10℃以下进行涂渍。不能用加热的方法蒸发溶剂，可置于干燥空气或氮气流下使溶剂挥发。最好用过滤法涂渍，器皿最好用聚乙烯容器。

固定相中固定液量（%）是每100g载体所涂渍的固定液重。由于不同品牌载体的视密度彼此不同，因而固定液给定涂渍量也就不相等。表6-2指出，其上边所列一些国外硅藻土载体涂渍量为3%时，与其左边所列载体涂渍量（%）相当的值。

表6-2　不同载体相当的涂渍量

载　体	Anakrom A	Anakrom Q	Anakrom SD	Chromosorb A	Chromosorb G	Chromosorb P	Chromosorb T	Chromosorb W	Chromosorb 750	Diatoport S	Gaschrom S,A,P,Z,Q	Gaschrom R	Supelcoport	Varaport 30
Anakrom A	3.0	3.7	4.7	5.3	6.4	5.2	5.4	3.0	4.7	3.0	3.7	5.2	3.0	3.0
Anakrom Q	2.5	3.0	3.8	4.4	5.3	4.3	4.5	2.5	3.8	2.5	3.0	4.3	2.5	2.5
Anakrom SD	1.9	2.4	3.0	3.4	4.1	3.4	3.5	1.9	3.0	1.9	2.4	3.4	1.9	1.9
Chromosorb A	1.7	2.1	2.6	3.0	3.6	2.9	3.1	1.7	2.6	1.7	2.1	2.9	1.7	1.7
Chromosorb G	1.4	1.7	2.2	2.5	3.0	2.4	2.5	1.4	2.2	1.4	1.7	2.4	1.4	1.4
Chromosorb P	1.7	2.1	2.7	3.1	3.7	3.0	3.1	1.7	2.7	1.7	2.1	3.0	1.7	1.7
Chromosorb T	1.7	2.0	2.6	3.0	3.6	2.9	3.0	1.7	2.6	1.7	2.0	2.9	1.7	1.7
Chromosorb W	3.0	3.7	4.7	5.3	6.4	5.2	5.4	3.0	4.7	3.0	3.7	5.2	3.0	3.0
Chromosorb 750	1.9	2.4	3.0	3.4	4.1	3.4	3.5	1.9	3.0	1.9	2.4	3.4	1.9	1.9
Diatoport S	3.0	3.7	4.7	5.3	6.4	5.2	5.4	3.0	4.7	3.0	3.7	5.2	3.0	3.0
Gaschrom S,A,P,Z,Q	2.5	3.1	3.8	4.4	5.3	4.3	4.5	2.5	3.8	2.5	3.0	4.3	2.5	2.5
Gaschrom R	1.7	2.1	2.7	3.1	3.7	3.0	3.1	1.7	2.7	1.7	2.1	3.0	1.7	1.7
Supelcoport	3.0	3.7	4.7	5.3	6.4	5.2	5.4	3.0	4.7	3.0	3.7	5.2	3.0	3.0
Varaport 30	3.0	3.7	4.7	5.3	6.4	5.2	5.4	3.0	4.7	3.0	3.7	5.2	3.0	3.0

三、填充柱的填充和老化

总起来说，装填充柱有两点要求：一是将固定相填充均匀、紧密、减少空隙和死空间；二是填充时不得敲打过猛，以免造成载体机械粉碎，致使柱性能变坏。操作多采用抽空装柱法，即将柱出口接真空泵抽气，固定相从入口倾入（安装色谱柱时，注意不要接反，否则固定相将在柱中移动，使柱效发生变化），为防止潮湿空气进入，可接$CaCl_2$和硅胶干燥塔。填充沸点较低的固定相，则不宜用泵抽装柱，一般采用边装边敲打的手工法填装。

填装聚四氟乙烯作载体的固定相，需将固定相冷冻过夜，然后在0℃填装到色谱柱中。色谱柱的湿气预先用干燥气体置换，以免0℃时色谱柱结冰，固定相结块。

对于内径小于1mm的微填充柱，因其长度较长，需在柱前压较高的情况下用特殊的装填方法[10,11]。即将螺旋柱沿垂直方向放入超声浴中，柱一端接真空泵，另一端接一压力容器。装柱过程中缓慢升高柱前压至一稳定值并保持。适于普通柱的固定相，一般也适于微填充柱。

老化色谱柱的目的是除去管柱内剩余的溶液、固定液的低沸程馏分及易挥发的杂质，同时使固定液更均匀地分布于载体或管壁上。老化的方法多采用气体流动法：将柱入口与进样室相连，出口勿接检测器，通以载气，以(2～4)℃·min⁻¹程序升温至低于固定液最高使用温度(20～30)℃，老化（12～24）h，获得平稳基线，则表明老化已合格。

空心柱的老化与填充柱基本相同，可参照施行。

第二节　空　心　柱

一、柱管的制备

（一）柱管管材

与前述填充柱使用的管材种类相同，以往空心柱也使用过金属、塑料、玻璃作为原材料；现在前两种已被淘汰，唯玻璃管材随着制备玻璃柱管技术不断革新，呈一枝独秀之态。

玻璃管材主要分普通玻璃管和石英玻璃管两大类。用于制作空心管柱的普通玻璃管有钠钙玻璃（或称软质玻璃）和硼硅玻璃（或称硬质玻璃）。钠钙玻璃组成为 $SiO_2$67.7%，Na_2O15.6%，CaO5.7%，MgO3.9%，$Al_2O_3$2.8%，$B_2O_3$0.8%，K_2O0.6%。因 Na_2O 等含量多，有碱性，易于催化分解硅氧烷类固定液和吸附酸性物质。硼硅玻璃组成为 $SiO_2$81%，$B_2O_3$12%，Na_2O3.0%，$Al_2O_3$20.%，K_2O1.0%。因其 B_2O_3 含量多，有酸性。目前使用硼硅玻璃居多，其所含杂质种类和数量都比较少。

用于制作空心管的石英玻璃管有人造石英管和天然熔融石英管。前者难得且价昂，现在一般只用后者。后者金属杂质含量虽稍多，但总含量未超过 100×10^{-6}；用其依下述方法制得的空心柱管壁很薄，柔韧性极好，使用时不易断裂，不足之处是管外壁涂的聚酰亚胺不耐高温。

（二）柱管拉制

拉制普通玻璃毛细管柱管所用拉管机如图6-1所示。其原理由Desty等[14]提出。拉管时，将玻璃原料管以一定速度送入熔化炉，软化后从熔化炉的另一端以一定速度拉成毛细管，通过成型弯管将其弯成螺旋形管柱。熔化炉的温度一般为(650～850)℃，成型弯管的温度为(550～625)℃。具体视玻璃成分和管径而定。一般硼硅玻璃比钠钙玻璃温度要高。为使管径均匀，速度和温度必须稳定。

玻璃原料管选用内径（2.0～6.0）mm，外径（4.0～10.0）mm，长1.5m以上的柱管，拉制成的毛细管内径(0.2～0.5)mm，圈径约为12m，长20m以上。原料管拉制前用50%HNO_3、5%HF水溶液洗涤，及用蒸馏水冲洗至中性，最后用丙酮冲洗，放置干燥。拉制后的毛细管，在涂渍前用蒸馏水、丙酮、溶解固定液的溶剂冲洗，氮气吹干。

拉制石英毛细管柱管示意图如图6-2所示。因要求在无尘条件下操作，设备昂贵，同时要求拉制速度1m·s⁻¹，熔融炉为(2100～2200)℃高温，技术复杂，故石英毛细管柱都是在专门工厂生产，不像玻璃毛细管柱可以在实验室自制。商品石英毛细管柱，规格有长度(10～15)m、(15～30)m、(30～60)m、(60～100)m多种，有内径0.05mm、0.10mm、0.15mm、0.18mm、0.20mm、0.22mm、0.25mm、0.35mm、0.53mm等。以使用内径0.25mm和0.35mm者居多。

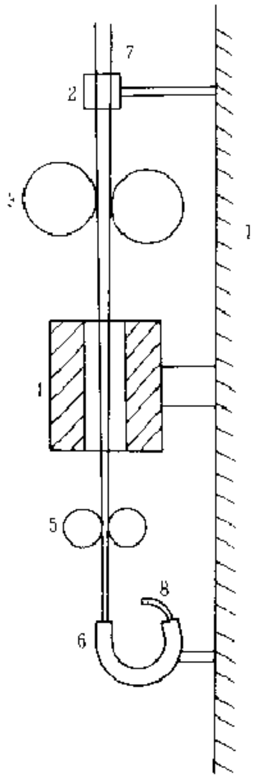


图 6-1 玻璃毛细管柱拉管机原理图
1—支架；2—送管架；3—送管轮；4—熔化炉；
5—受管轮；6—成型弯管；7—玻璃原料管；
8—玻璃毛细管

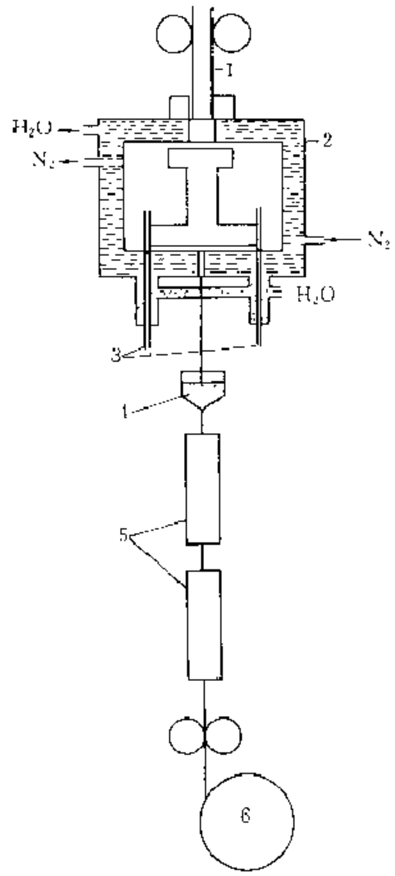


图 6-2 石英毛细管拉制示意图
1—融熔石英管；2—石墨炉；3—电极；
4—聚酰亚胺；5—熔化炉；
6—缠绕上架

二、柱管预处理

欲制得高效、惰性、热稳定性好的空心柱，需在涂渍固定液前对管内壁表面作适当的预处理，否则多数固定液不能很好地润湿未经处理的柱内壁表面，涂布的液膜不均匀也不稳定，收缩的液珠严重影响柱效，并且柱壁的活性点使样品中的极性组分拖尾，微量组分甚至会因吸附而不流出；对某些固定液还会引起催化分解。在涂渍固定液前，将柱内表面进行处理的主要方式是提高管柱内壁表面对固定液的润湿性和除去表面活性中心。

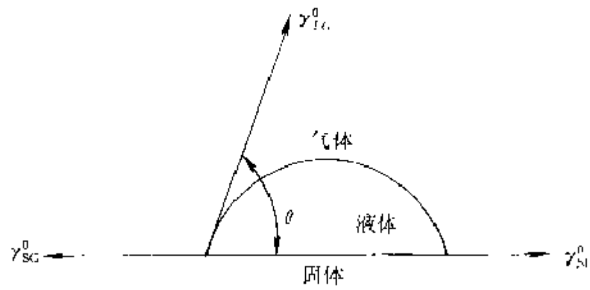


图 6-3 接触角图

（一）柱管内壁的润湿性

液体在固体表面上均匀分散的程度称为润湿性，它与两者的比表面自由能有关。只有液体的比表面自由能小于固体时，液体才能分散开，否则将在固体表面形成液滴。若将固体表面与正切于液滴的夹角定义为接触角 θ，如图 6-3 所示，则可用 $\cos\theta$ 判定润湿性；液体对固体不形成接触角时液体的表面张力定义为固

表 6-3 部分气相色谱用固定液的表面张力 (20°C)[8,9]

固定液	γ/(mN·m^{-1})	固定液	γ/(mN·m^{-1})
甲基硅油	19.2	Ucon 50 LB 550X	31.4
OV-101	20.4	癸二酸二辛酯	32.2
OV 210	23.6	Apiezon L	33.2
QF 1	24.6	Triton	34.0
OV-3	21.8	Ucon 50 HB 2000	35.7
1 十八烯	27.6	2,4 二甲基-1,1-二氧四氢化噻吩	38.1
Ucon DLB 100 B	28.3	聚丙二醇癸二酸酯	40.2
邻苯二甲酸二癸酯	28.5	磷酸三甲苯酯	40.9
邻苯二甲酸二壬酯	28.8	聚乙二醇 400	44.2
鲨鱼烷	30.0	OS-124	46.1
柠檬酸三丁酯	30.4	β,β 氧二丙腈	48.6
双(乙基己基)癸二酸酯	31.1	1,2,3 三(2 氰乙氧基)丙烷	49.2
聚丙烯二醇	31.3	双甘油	50.3
双(2-乙基己基)邻苯二酸酯	31.3	丁二酸二乙二醇酯	50.9
OV 17	31.4		

体的临界表面张力 r_c ($\cos\theta=1$, $\theta=0$)。固定液的表面张力一般为 (20～50) mN·m^{-1} (dyne/cm)。表 6-3 列出部分固定液的表面张力。经过清洗后的玻璃和石英柱管有很高的表面自由能，能被大部分固定液润湿；而潮湿和不纯净的管壁，自由能约为 (25～50) mN·m^{-1}，不能被很好润湿。有二条途径可以提高柱管内壁的润湿性，一是使柱管内表面张力变大；二是加添表面活性剂使固定液和溶剂的表面张力变小，现分述如下：

1. 柱管内壁改性法

可以用化学的腐蚀方法或物理的加固体方法使柱管内壁变粗糙，达到使之润湿目的。

化学腐蚀法只适用于普通玻璃制备的毛细管柱，虽然有许多文献报道，其中以用 HCl 处理钠钙玻璃毛细管柱使内壁生成氯化钠结晶[18-19]和用 HF 处理硼硅玻璃毛细管柱使生成 SiO_2 晶须[20,21]是比较好的方法。

使用 HCl 处理法时，可以将 HCl 气体连续地通过置于350°C的钠钙玻璃柱管 2h，或将 HCl 气体充满柱管，封死其两端后，在360°C加热 3h。前者在内壁生成的氯化钠晶体颗粒比后者均匀，却不及后者大。此法的缺点是晶体形成情况与玻璃表面组成有关，难于重复；涂渍液会溶解少量氯化钠晶体；由于内壁有碱性物质，产生吸附性和在高温催化分解固定液。

氟化氢处理法是直接将 HF 气体或加热后可产生 HF 气体的物质置于硼硅玻璃柱管内，在高温下进行腐蚀，使内壁产生 SiO_2 须状物（其表面积可为光滑玻璃的上千倍，甚至更高）。因 HF 有剧毒，后来常将 NH_4HF_2 分解成 HF 气体及 NH_3，即以 5g/100mlNH_4HF_2 的甲醇饱和溶液，盛于柱管内，1h 后用 N_2 吹出，把柱管两端封死，在450°C加热 3h，使分解出的 HF 气腐蚀柱管内壁生成晶须，冷却后用甲醇彻底清洗管柱，用 N_2 吹干，供下一步制备[21]。此法缺点是晶须不易脱活，导致柱效不高。

将上述化学腐蚀方法处理的柱管涂渍固定液，制成的空心柱就是处壁空心柱 (wall treated open tubular column, WTOT)。

用固体使柱管内壁粗糙的物理方法有两种。其一是在玻璃管内填装固体，然后拉制成空心柱管，固体则嵌在柱内壁（固体若不是吸附剂则拉制后要涂渍固定液），此空心柱就是填充

毛细管柱（packed capillary column）。另一是在拉制的空心柱管内壁沉渍一层多孔性物质，如石墨化碳黑、分子筛、氧化铝、二氧化硅、硅藻土载体，然后不涂渍或涂渍固定液。这样制成的空心柱就是多孔层空心柱（porous layer open tubular column，PLOT）其中沉渍物是硅藻土载体，特称涂载体空心柱（support coated open tubular column，SCOT）。

2. 表面活性剂处理

用表面活性剂可降低固定液、溶剂的比表面自由能，使固定液与溶剂表面张力减小。表面活性剂是有憎水基和亲水基组成的化合物，能粘附于玻璃管柱内壁的硅醇基团及 Lewis 酸中心，形成定向的单分子层，既起脱活又起固定液分散作用[23,24]。最常用的表面活性剂是氯化苄基三苯基鏻（BTTPPC），其次是溴化（十八烷基）甲基溴化铵（Qas-Quat L）与四苯硼酸钠（Kalignosl）。一种实施方法是在涂渍固定液之前，将1%表面活性剂（CH_2Cl_2 溶液）用动态法涂于管柱内壁[25]。另一种方法是将表面活性剂加入固定液中，与固定液同时涂于管柱内壁。

（二）柱管内壁的脱活

柱管的活性是指对组分、固定相有吸附、催化性能。它是由于管柱内壁表面有硅醇基、金属氧化物及处理柱管内壁后残留的活性物而产生的。柱管内壁有活性，能增大色谱峰峰宽。在柱温高时，固定液易于从色谱柱流失，使柱寿命缩短及柱效降低，因此需对柱管内壁进行脱活处理。然而至今尚无通用的脱活方法，因为有效的脱活方法既取决于玻璃和石英的特性、涂渍的固定液，还与被分析样品的种类等诸多因素有关。脱活方法原则上分三类：其一是除去或减少这些活性物质；其二是改变这些活性基团的性质；其三是把这些活性基团隐蔽起来，使之不发生作用。下面介绍一些具体方法：

1. 沥滤法

对于玻璃空心管柱，此法是用盐酸或氯化氢将其内壁表面的碱金属和碱土金属离子除去。可以用动态法或静态法沥滤柱管，然后在150℃通 N_2 气进行干燥。此法同时使内壁表面的羟基增多，需进一步硅烷化处理，以免表面的活性有新的增加。

顺便指出，对于石英空心管柱，因其杂质极少，无进行沥滤的必要。由于是在高温拉制，表面羟基含量极少，常用水处理方法增加表面羟基量，也有人用盐酸或硝酸处理的方法，最后作硅烷化处理。

2. 化学键合法

通过化学反应用惰性基团取代柱管内壁表面的羟基，是最常用的脱活方法。以硅烷化法和酯化法效果最好。

硅烷化法的基本原理是用硅醚基取代活性的羟基，生成 Si—O—Si—C 键。硅烷化试剂主要有三甲基氯硅烷、六甲基二硅氮烷（或两者混合物）、二甲基二氯硅烷、三苯基氯硅烷等。现多采用高温硅烷化去活性，简称 HTS（high temperature silylation），反应温度在（300～400）℃，方法是[26]用 N_2 将硅烷化试剂以（4～5）$cm \cdot s^{-1}$ 的速度通过柱管，然后将柱管两端封死，以（2～3）$℃ \cdot min^{-1}$ 缓慢升温速率加热，至（300～400）℃，保持（4～20）h，最后用甲苯和甲醇依次冲洗，N_2 气吹干。

酯化法是利用羟基与聚酯反应生成 Si—O—C 键，但其热稳定性不如 Si—O—Si—C 键。常用的酯化试剂为 PEG-20M。方法是在柱内壁涂渍一层 PEG-20M 溶液，然后封死柱子两端，在280℃加热 24h，冷却后用二氯甲烷冲洗，N_2 气吹干[12]。

3. 掩蔽法

掩蔽法是用一些表面活性剂或固定液来掩蔽管柱内壁的活性中心。曾用的表面活性剂有苄基三苯基氯化膦、四苯基硼酸钠、三乙醇胺等。如用三乙醇胺脱活时，可将5%三乙醇胺的二氯甲烷溶液，按动态法以 $2cm \cdot s^{-1}$ 通过柱管两次，用 N_2 气吹干，125℃加热18h，然后用甲醇、二氯甲烷洗去剩余的三乙醇胺[1]。

三、固定液的涂渍与交联固化

（一）固定液的涂渍

经过预处理后的毛细管柱管即可进行涂渍。为了获得最高柱效，应将固定液均匀完全覆盖柱壁内表面。常用的涂渍方法有静态法、动态法两种。

1. 动态法

根据固定液的粘度和极性不同，以二氯甲烷或丙酮作溶剂，配成（5～30）g/100ml 溶液，放入适当容器内，用高压 N_2 在严格控制流速条件下将固定液压入毛细管柱管内，当25%柱体积被充满时，将插入固定液端的毛细管提起，让 N_2 气流以（1～2）$cm \cdot s^{-1}$ 稳定流速推动液栓流过柱子，为防止液栓离开柱子时柱压突然变化，柱后连接一段内径相同、长度为1/4涂渍柱长的缓冲柱。涂后的柱子继续通 N_2 气（3～4）h 以完全去除溶剂。动态涂渍装置如图6-4所示。

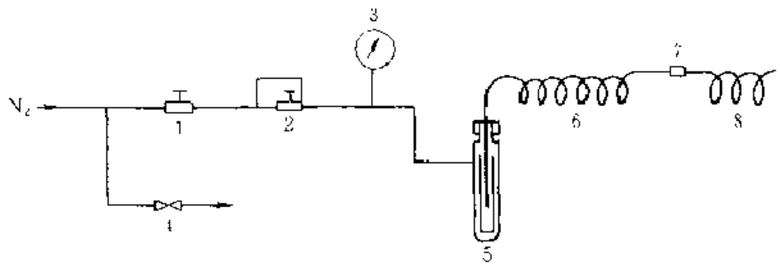


图6-4 动态法涂渍空心柱装置

1—稳压阀；2—稳流阀；3—压力表；4—针形阀；5—涂渍瓶及盛涂渍溶液的玻璃试管；6—空心柱；7—接头；8—尾柱

动态法适宜涂渍粘度低、流动性好的固定液，涂渍厚度和均匀性取决于涂渍液的浓度、粘度、温度、流动速度及溶剂的挥发速度。方法简便、快速，但重复性差，柱效也比静态法低。液膜厚度难以准确预测。为了提高动态法的成功率，Schomburg 等提出了汞塞动态涂渍法[12]。此法是将一小段汞插在涂渍液与推动气之间，因为汞有很高的表面张力，经汞塞滚压后可将多余的涂渍液从柱内壁表面移出柱外，从而在柱内壁形成薄而均匀的液膜，改善涂渍效率，提高柱效。此法可涂渍浓度较大和粘稠的固定液。

2. 静态法

对于表面张力较大或粘稠的固定液应采用静态法涂渍。其优点是重现性好，柱效高、液膜厚度能准确计算，但粘度低的固定液不宜用此法。静态涂渍的操作是用抽入或压入法将用戊烷、二氯甲烷等易挥发溶剂配成的体积百分浓度为0.02%～4.0%固定液充满柱子，一端封死，先放置数小时，再将另一端接真空泵，在低于溶剂沸点（10～15）℃恒温条件下使溶剂缓慢蒸发。在柱中留下的液膜厚度约为 $rc/200$，r 为柱内径，c 为涂渍液浓度（体积分数），具体如图6-5所示。

图6-5 静态真空抽空涂渍装置

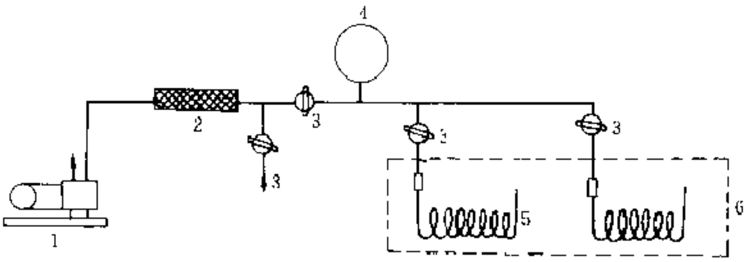


图 6-5 静态法真空抽空涂渍装置

1—机械真空泵；2—硅胶干燥管；3—玻璃真空活塞；4—玻璃缓冲瓶；
5—空心柱；6 恒温装置

静态法主要问题是溶剂与封口的交界面不能留下气泡，否则它会部分或全部将柱内涂渍液带出柱外，使涂柱失败。常用的封口物质有水玻璃、有机胶、各种蜡脂等。

上述静态法的主要缺点是比较费时。进一步发展的自由逸出静态涂渍法[28]则有了很大改进。此种方法不需要真空，一端封死，另一端开口，保持大气压。在远高于溶剂沸点的 75 ℃或 80 ℃恒温条件下，使溶剂快速蒸发。方法简便，涂渍速度快。柱效高，液膜准确可测，特别对长而细径的柱子涂渍尤为明显。一般丙酮-戊烷混合液适于溶解非极性和弱极性硅酮类固定液；戊烷-二氯甲烷混合液适于溶解极性固定液。

以上将固定液涂渍于毛细管柱内壁形成的色谱柱被称为涂壁空心柱（wall coated open column，WCOT），其优点是可用多种有机化合物作为固定液，制备操作简单；缺点是其热稳定性差，导致柱寿命较短，且不耐溶剂的损害。

（二）固定液的交联固化

为了使固定液能牢牢地附在柱管内壁，人们曾研究将固定液与毛细管柱内壁表面上的基团相互作用，制造化学键合的空心柱[16]。例如将端羟基聚硅氧烷固定液涂渍的空心柱，在通气的情况下，程序升温至规定温度，然后恒定温度使固定液与柱内壁的羟基缩合，实现化学键合。这种化学键合空心柱虽然研制成功，但柱效不够理想。后来人们进一步研究将固定液在柱内壁交联固化（有极少部分固定液与柱管内壁进行化学键合）[17]，取得极好的效果[22]。现在这种交联固化空心柱已呈后来居上之势，被广为应用。其制备方法现在主要用原位自由基引发法，有以下几种：

1. 过氧化合物或偶氮化合物引发交联

此种交联法的机理是，通过不同自由基母体产生的自由基引发交联形成 Si—C—C—Si 链段交联结构。

过氧化合物引发剂有过氧化苯甲酰（BP）、过氧化二异丙苯（DCUP）、过氧化叔丁基（TBP）等，偶氮化合物引发剂有偶氮叔丁烷（ATB）、偶氮叔辛烷（ATO）、偶氮异丁腈（ATBN）等。比较常用的是 DCUP 和 ATB。比较而言，偶氮化合物更为理想，它不氧化固定液，副产物对柱极性和活性没有影响，适用于极性和非极性固定液交联。

引发交联过程中，固定液的性质（包括取代基的种类、链长等）对交联结果影响很大。例如固定液中含乙烯基和甲苯基有利于引发交联，苯基和氰基则不利于交联，且原始链长长，所需交联剂量少，有利于交联。

2. 臭氧引发交联

臭氧也是一种有效的交联剂，可用于非极性和中等极性固定液。固定液中含甲苯基和乙

烯基同样有利于交联。不含甲苯基的氰丙基苯基聚硅氧烷极性固定液则不能被交联。此法的优点是交联条件易于控制，重复性好，设备简单，无残留副产物。

3. 辐射法

操作要点为将涂好固定液的柱子用 γ 射线辐照，辐射剂量为 $0.5MR \cdot h^{-1}$，照射（0.2～100）h。其优点是不会引入任何杂质，结果可靠。能用于非极性和中极性固定液的交联。

四、填充柱与空心柱的比较

最初色谱柱只有内径 2mm 以上填充着固定相的填充柱和内径约 0.25mm 内壁涂着固定液的毛细管柱（后来毛细管柱又称为空心柱）。随着色谱柱制备技术的改进，色谱柱种类增多，有如表 6-4 所示。

表 6-4 色谱柱的类别

类别	名　称	特　点
填充柱	经典填充柱	柱内径(2～4)mm，向柱管填充固定相而成，用于分析样品
	微型填充柱	柱内径约 1mm，柱管内填充微粒固定相而成，也用于分析样品
	制备填充柱	柱内径大于经典填充柱，制法同经典填充柱，用于制备纯化合物
空心柱	涂壁空心柱	柱内径(0.1～0.6)mm，柱内壁涂渍固定液而成，用于分析复杂样品
	处壁空心柱	柱内径(0.2～0.6)mm，柱内壁经化学处理后涂渍固定液
	化学交联空心柱	柱内径(0.1～0.6)mm，固定液化学交联于柱内壁而成
	多孔层空心柱	柱内径(0.2～0.6)mm，柱内壁涂附有固体，固体多为吸附剂
	涂载体空心柱	柱内径(0.2～0.6)mm，柱内壁涂附的固体是载体，固定液涂渍其上
	填充毛细管柱	柱内径约 1mm，将固体疏松地装入玻璃管柱内，然后拉制而成

依据使用的情况，将经典填充柱与空心柱进行比较可得到以下一些看法（填充毛细管柱已极少使用，故不予讨论）。

①载气通过空心柱的阻力远小于填充柱，故可使用很长的空心柱，却不能使用长的填充柱。

②当固定相与柱温相同时，为达到分离两组分相同的分辨率，空心柱所需分析时间比填充柱要短；而维持相同的所需分析时间，则空心柱分离两组分的分辨率优于填充柱。

③当固定相相同时，使用空心柱时的柱温常稍低于填充柱。

④填充柱的制备方法简单，使用方便，故气体样品和易于分离的样品分析，现在仍多用填充柱。

⑤分析痕量组分时，若填充柱能将痕量组分与其他组分很好地分离，则用填充柱有利于检测，否则应该用空心柱，使之与其他组分分离，才能定量检测。

⑥分析异构体和复杂混合物样品时，空心柱优于填充柱。

顺便指出，若将涂壁空心柱与涂载体空心柱作比较，可以认为前者柱效优于后者（使用的载气线速不能高于后者），而柱负荷不如后者。读者欲知更多的填充柱与空心柱的比较，可参阅文献[29～31]。

参 考 文 献

1 Giddings J C. J Chromatogr, 1960; 3: 520

2 Giddings J G. Anal Chem, 1965; 37: 1580
3 Matsen J M, Harding J W. J Chromatogr, 1963; 12: 115
4 Green L (HP Crop Arondale, Penne). unpublic work
5 Horning E C, Moscatelli E A, Sweeley. C C. Chem Ind (London), 1959: 751
6 Purcher J I, Urone P. J Gas Chrom, 1964; 2: 184
7 Averill W. J Gas Chrom, 1963; (1): 34
8 Pelsev N D, Kostova K, Filchev P I. J Chromatogr, 1987; 148: 484
9 Chaaun L, Shanfield H, Zlatkis A. Chromatographia, 1984; 18: 11
10 Zlatkis A, Poole C F, Brazell R S, et al. HRC & CC, 1979; 2: 423
11 Pretorius V, Rohwer E R, Apps P J, et al. J Chromatogr, 1984; 289: 17
12 Blomberg L, Wannman T. J Chromatogr, 1978; 148: 379
13 Dandeneau R D, Zerenner E H. HRC& CC, 1979; 2: 351
14 Desty D H, Haresnip J N, Whyman B H F. Anal Chem, 1960; 32: 302
15 Sandra P, Verzele M. Chromatographia, 1979; 8: 119
16 正田芳郎, 桥本圭二, 井上武久等. 药学杂志, 1977; 97: 473
17 Madani C, Chambaz E M, Rigand M, et al. J Chromatogr, 1976; 126: 161
18 Alexander G, Rutten G A F M. Chromatographia, 1973; 6: 231
19 Franken J J, Rutten G A F M, Rijks J A. J Chromatogr, 1976; 126: 117
20 Schieke J D, Comins N R, Pretorius V. Chromatographia, 1975; 8: 354
21 Onuska F I, Comba M E, Bistricki T, et al. J Chromatogra, 1977; 142: 117
22 Grob K, Grob G. HRC & CC, 1982; 5: 13
23 Rutten G A F M, Luyten J A. HRC & CC, 1972; 74: 177
24 Franken J J, Trijbels M M F. HRC & CC, 1974; 91: 425
25 Badings H T, van der Pol J T G, Wassink J G, Chromatographia, 1975; 8: 440
26 Grob K, Jr, Grob G, Grob K. J Chromatogr, 1981; 219: 3
27 Schomberg G, Husmann H. Chromatographia, 1975; 8: 517
28 Xu B, Vermenlen N P E. Chromatographia, 1984; 18: 642
29 Ettre L S. Open Tubular Columns in Gas Chromatography. New York: Plenum Press, 1965
30 Ettre L S. Introduction to Open Tubular Column. Norwalk: Perkin Elmer, 1975
31 Lee M L, Yang F J, Bartle K D. Open Tubular Column Gas Chromatography. New York: John Wiley & Sons, 1984
32 Necasova M, Terank K. J Chromatogr, 1973: 79: 15
33 Lee M L, Wright W. J Chromatogr, 1980; 184: 235

（杨 黎）

第七章 检 测 器

气相色谱分析时，组分经色谱柱分离后，在检测器中被检测，并且依其含量变化有相应的信号输出；由于产生的信号及其大小是组分定性和定量的依据，因此检测器是气相色谱仪的一个重要部件。

第一节 检测器的分类

气相色谱检测器可按其流出曲线、检测特性和检测功能等进行分类。

一、按流出曲线类型分类

组分经柱分离后进入检测器，检测器给出不同流出时间各组分浓度的信号，即色谱流出曲线。不同检测器给出不同类型的色谱流出曲线。

（一）积分检测器

这类检测器输出的响应值取决于组分随时间的累积量。

$$响应值 = a\int_0^t c(t)\mathrm{d}t + b \tag{7-1}$$

其所得色谱图为一台阶曲线，如图 7-1 所示。

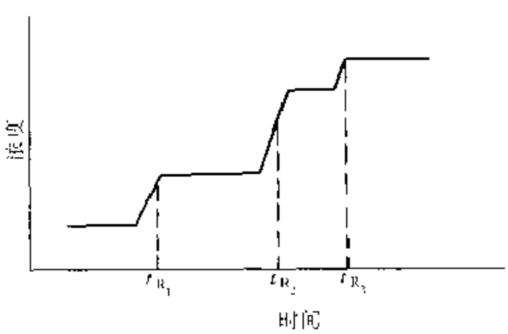


图 7-1 积分式色谱流出曲线

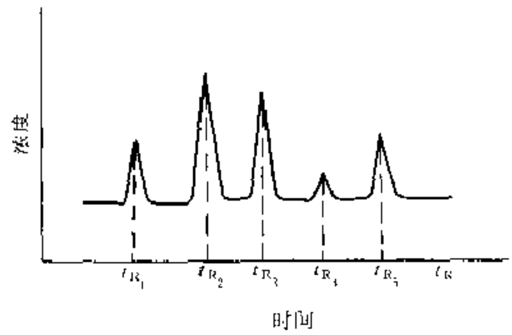


图 7-2 微分式色谱流出曲线

每一台阶代表一个组分，台阶高度正比于该组分的含量，故对定量很方便。这类检测器有体积检测器、滴定检测器、电导率检测器等。

（二）微分检测器

这类检测器的响应值取决于组分随时间瞬间量的变化。

$$响应值 = f(c) \tag{7-2}$$

其所得谱图为一系列峰形的曲线，如图 7-2 所示。图中的峰代表组分。峰上各点表示该瞬间某组分的含量。整个峰面积才代表该组分的总量。这对定量分析虽有不便，但对用峰顶时间进行组分定性却很方便。此类检测器目前应用最为广泛，有热导检测器、氢火焰离子化检测器、电子捕获检测器、火焰光度检测器等。

二、按检测特性分类

Halasz[1] 根据检测特性将其分为两类。

（一）浓度敏感型检测器

此类检测器的响应值取决于载气中组分的浓度，当进样量相同，载气流速改变时，色谱峰的峰高 h 在一定范围内基本不变，而峰面积 A 则随载气流速增加而减少，如图 7-3 所示。此类检测器适宜用峰高定量。其代表有热导检测器和电子捕获检测器。

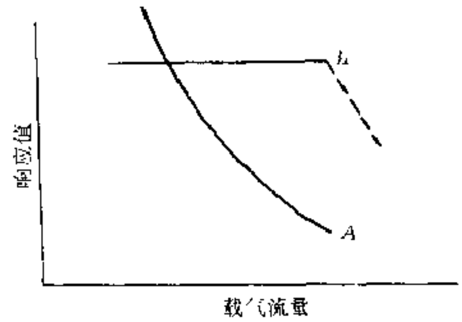


图 7-3　浓度型检测器的特性

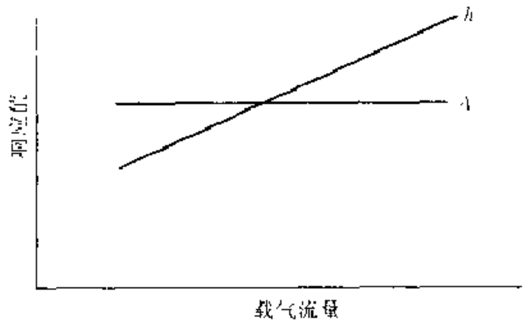


图 7-4　质量型检测器的特性

（二）质量敏感型检测器

此类检测器的响应值与样品的质量流速有关，当进样量相同，载气流速改变时，色谱峰的峰面积 A 在一定范围内基本不变，而峰高 h 则随载气流速增加而增高，如图 7-4 所示。此类检测器适用于峰面积定量，其代表有火焰离子化检测器和火焰光度检测器。

此外还可以根据检测时组分是否被破坏，分为破坏性检测器（如 FID，FPD）和非破坏性检测器（如 TCD，ECD）；根据检测功能分为通用型检测器（如 TCD，FID）和选择性检测器（如 FPD，ECD，NPD）；或按检测性质的原理分类，见表 7-1[2]。

表 7-1　气相色谱仪主要检测器分类表

类　别	名　称	类　别	名　称
整体性质检测器	热导检测器	常压电离检测器	微波等离子检测器
	表面声波晶体检测器		微波电离检测器
电化学检测器	霍尔检测器	光学检测器	化学发光检测器
常压电离检测器	氢火焰离子化检测器		原子发射检测器
	光离子化检测器		火焰光度检测器
	氦离子化检测器		原子吸收检测器
	氩离子化检测器		红外检测器
	表面离子化检测器		近红外原子发射检测器
	氮磷检测器		振荡等离子发光放电检测器
	电子捕（俘）获检测器		表面增加拉曼光谱检测器
	离子淌度检测器	质谱检测器	质谱检测器

第二节　检测器的评价

气相色谱检测器一般需满足以下要求：

①通用性强，能检测多种化合物；或选择性强，只对特定类别化合物或含有特殊基团的

化合物有特别高的灵敏度。

②响应值与组分浓度间线性范围宽，既可做常量分析、又可做微量、痕量分析。

③稳定性好，色谱操作条件波动造成的影响小，表现为噪声低、漂移小。

④检测器死体积小、响应时间快。

以上要求可用检测器的噪声、漂移、线性范围、灵敏度、检测限、最小检测量、响应时间和选择性等指标进行评价[3]。

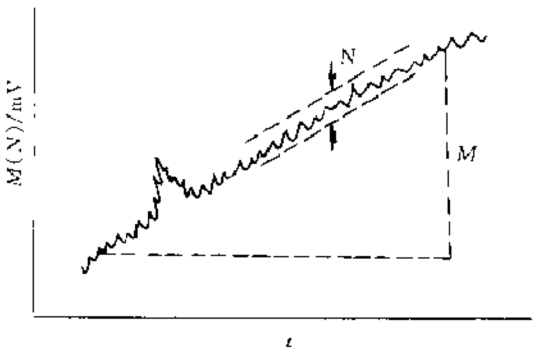


图 7-5　噪声（N）与基线飘移

一、基线噪声与基线漂移

在没有样品进入检测器的情况下，仅由检测器本身及操作条件的波动(为固定相流失、橡胶隔垫流失、载气、温度、电压的波动及漏气等因素)使基线在短时间内发生波动的信号称为基线噪声或噪声(N)，其单位用毫伏(mV)或毫安(mA)表示。基线在一段时间内产生的偏离，称为基线漂移或漂移(M)，其单位用毫伏/小时($mV \cdot h^{-1}$)或毫安/小时($mA \cdot h^{-1}$)表示，如图 7-5 所示。

二、线 性 范 围

检测器的线性范围是指检测器内载气中组分的浓度 Q 与响应值 R（峰高或峰面积）成正比的范围。以最大允许进样量与最小进样量的比值表示(见图 7-6)。当进样量范围很大时，可用双对数或单对数坐标作图。

$$线性范围=\frac{Q_{max}}{Q_{min}} \tag{7-3}$$

而 Q_{min}为检出极限确定的最小检测量；Q_{max}为偏离线性±3%处的进样量。若线性有变化，但能在很窄的范围内进行校正，则该范围还是可用的，称之为线性动态范围。

三、灵 敏 度

（一）灵敏度的定义

气相色谱检测器的灵敏度 S 是，检测器中物质量变化 ΔQ 时信号量的变化率，即图 7-6 所示线性范围线段的斜率。

$$S=\frac{\Delta R}{\Delta Q} \tag{7-4}$$

此式中信号量的变量 ΔR 的单位为毫伏(mV)；物质量的变量 ΔQ 的单位应依检测器的类型而定，故灵敏度 S 的单位随之而变，如：

(1) 浓度型检测器　当 Q 的单位定义为每 1ml 载气中所含组分的体积（ml）时，则对应检测器的体积灵敏度 S_v，单位为 $mV \cdot ml \cdot ml^{-1}$。当 Q 的单位定义为每 1ml 载气中所组分的质量（mg）时，则对应检测器的质量灵敏度 S_g，单位为 $mV \cdot ml \cdot mg^{-1}$。

(2) 质量型检测器　当 Q 的单位定义为每 1s 所通过的组分的质量（g）时，则对应检测器的灵敏度 S_t，单位为 $mV \cdot s \cdot g^{-1}$。

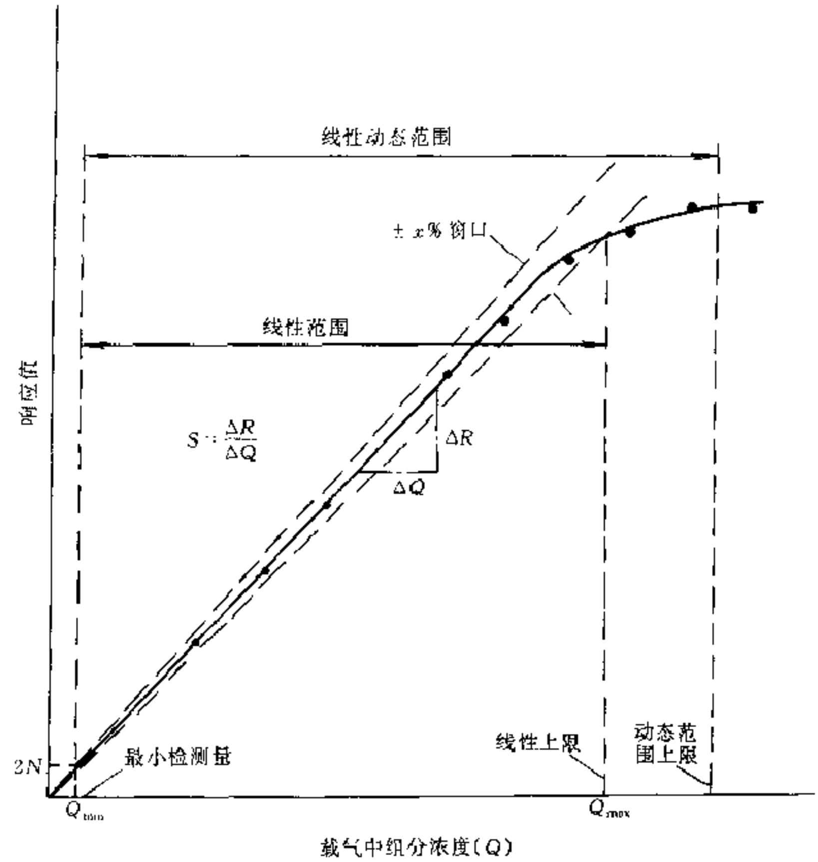


图 7-6 检测器的线性范围和灵敏度

灵敏度之间的换算如下：

$$S_g=S_v\frac{22.4}{M}=S_t\frac{F_d}{60\times1000} \tag{7-5}$$

式中，M 为组分的分子量；F_d 为在检测器温度和大气压下载气的流量，$ml\cdot min^{-1}$。

（二）灵敏度的测定

1. 浓度型检测器灵敏度的测定

通常按照 Dimbat 等[4]提出的方法，即一定量组分所得色谱峰面积为 A_i 时，灵敏度 S_i 用下式计算

$$S_i=\frac{u_2}{u_1}\cdot\frac{F_d}{m_i}\cdot A_i \tag{7-6}$$

式中，A_i 为峰面积，cm^2，u_2 为记录器的灵敏度，$mV\cdot cm^{-1}$；u_1 为记录纸移动的速度，$cm\cdot min^{-1}$；S_i 依进入检测器的物质的量 m_i 的单位而定。当 m_i 的单位为 ml 时，S_i 就对应为体积灵敏度 S_v；当 m_i 的单位为 mg 时，S_i 就对应为质量灵敏度 S_g。

2. 质量型检测器灵敏度的测定

根据这种检测器的特性，组分的质量应等于组分检测的全部时间内浓度的积分。

$$m_i=\int_0^{\infty}c\mathrm{d}t \tag{7-7}$$

通过积分可得[5]，

$$S_t=\frac{60u_2}{u_1m_i}A_i \tag{7-8}$$

式中，S_t 是质量型检测器的灵敏度，其他符号同式（7-6）。

四、检 测 限

人们规定以检测器二倍噪声的水平来评价检测器的灵敏度，并称之为检测器的检测限 D_t（亦称敏感度），用下式计算。

$$D_t=\frac{2N}{S_t} \tag{7-9}$$

D_t 的单位随 S_t 不同而异。对浓度型检测器，$D_v=2N/S_v$，其单位为每毫升载气所含组分的体积（$ml \cdot ml^{-1}$）；$D_g=2N/S_g$，其单位为每毫升载气所含组分的质量（mg）。对质量型检测器，$D_t=2N/S_t$，其单位为每秒钟时间内所通过组分的质量 $g \cdot s^{-1}$。

五、最小检测量与最小检测浓度

人们规定能产生 2 倍噪声信号的组分的量就是检测器的最小检测量 m_{min}，可用下述公式进行计算。

①浓度型检测器　在检测极限情况时，峰高等于噪声 2 倍（即 $hu_2=2N$），由于 $A_t=1.065hw_h$ 依公式（7-6）移项可得：

$$m_{min}=\frac{1.065F_d}{u_1}\cdot w_h\cdot D_t \tag{7-10}$$

式中 m_{min} 单位为 ml 或 mg，依 D_t 单位而定。

②质量型检测器　同理，依公式（7-7）移项可求得：

$$m_{min}=\frac{1.065\times 60}{u_1}\cdot w_h\cdot D_t \tag{7-11}$$

m_{min} 单位为 g，以上式中 w_h 为色谱峰半高处的峰宽（即半高峰宽）。

从最小检测量可以求出在一定进样量时组分能被检测出的最低浓度，即最小检测浓度 C_{min}。

$$C_{min}=\frac{m_{min}}{V} \tag{7-12}$$

或

$$C_{min}=\frac{m_{min}}{m} \tag{7-13}$$

式中　m_{min}——最小检测量；

V——进样体积；

m——进样质量。

六、响 应 时 间

气相色谱检测器的响应时间，是指进入检测器的组分输出达到其真值的 63%所需的时间。一个好的检测器应当迅速和真实地反映通过它的物质浓度的变化，即要求响应时间要短。响应时间是柱后谱带扩张的主要因素，成为一些检测器设计中的一个重要指标（如 TCD）。普通 TCD 的体积 V_0 通常为 1ml 左右，若通过 TCD 的载气流量 F_d 按 $30ml \cdot min^{-1}$ 计，则检测器的响应时间为

$$0.63\cdot\frac{V_0}{F_d}=0.63\cdot\frac{1}{30/60}s=1.26s \tag{7-14}$$

表 7-2 常用气相色谱检测器性能一览表

中文名称	英文或缩写	适用性	选择性	载气	线性范围	检测限	稳定性	温度限/℃	其他
热导检测器	TCD	所有化合物	非选择性	H_2、He、N_2	10	10^{-7}～10^{-9}	良	450	采用微型 TCD 可与毛细管柱联用
氢火焰离子化检测器	FID	有机化合物	对永久性气体，水、$SiCl_4$、甲酸等无输出信号或输出信号很小	H_2、N_2、He	5×10^6～5×10^7	10^{-11}～10^{-13}	优	450	
电子捕获检测器	ECD	卤素或含氧化合物	电负性化合物输出信号极大	Ar、N_2＋10% CH_4	10^2～10^4	10^{-13}～10^{-14}	可	200～400	最高适用温度：^3H200℃、^{63}Ni400℃、Sc^3H325℃、Pm 400℃
火焰光度检测器	FPD 或 DFPD	硫、磷化合物	10^4～10^6	He、N_2	在双对数坐标上对 S10^3；对 P10^3～10^4	10^{-11}	—	300	选择性指 S、P 化合物的输出信号与碳氢化合物输出信号之比
氮磷检测器	NPD 或 AFID	硫、磷、氮化合物	10^2～10^4	He、N_2	10^3	10^{-12}～10^{-14}	可	300	选择性含意同上，又称热离子化检测器
光离子化检测器	PID	电离势低于 10.2eV 的所有化合物		N_2、H_2、空气	10^7～10^6	10^{-13}		250	
电解电导检测器	electrolyte conductivity detector	硫氮和卤素化合物	$m_N/m_C>10^6$ $m_S/m_C>10^5$ $m_X/m_C>10^6$	He、N_2	10^5 $>10^4$ 10^6	2.4×10^{-12} 2×10^{-12} 5×10^{-13}	—		X 为卤素化合物。最新式电解电导检测器为霍尔检测器，记为 HECD 或 HAIID
氦离子化检测器	HeID	普遍适用，尤其永久性气体		He	10^3～10^2	10^{-12}～10^{-14}	劣	100	适用于高纯气体中电离能低于 24.5eV 的极微量的永久性气体的分析

续表

中文名称	英文或缩写	适用性	选择性	载气	线性范围	检测限	稳定性	温度限/℃	其　他
离子阱或质量选择检测器	ITP or MSD	对质量数在20～650（ITP）或10～800（MSD）原子质量单位的许多物质均有输出信号	非选择性［全扫描检测］选择性［选择性离子检测SID］	真空	10^4	$<1\times10^{-9}$ $<1\times10^{-12}$	优	-	近年来广泛与毛细管柱联用
红外检测器	IRD	各种有机化合物	非选择性		—	-	可	—	傅立叶变换红外检测器与毛细管柱联用已成为强有力的定性分析手段
微波等离子体检测器	MPD	农药残留、大气，食品血液和残渣中有毒物和其他环保分析	可同时测定C，H，D，O，N，F，Cl，Br，I，S，P等元素	He，Ar	$10^3\sim10^2$	$10^{-9}\sim10^{-10}$	—	—	与FID联用，可估算化合物中各元素含量比
氩离子化检测器	AID	普遍适用，尤其永久性气体	非选择性	Ar	10^5	10^{-12}	-	-	适用于高纯气体中电离能低于15.7eV的极微量的永久性气体的分析
放电检测器	discharge detector	所有化合物	非选择性	He，Ar	$10^2\sim10^4$	$10^{-10}\sim10^{-12}$	—	—	He作载气时灵敏度高于Ar作载气
火焰发射检测器	FED	所有化合物	非选择性	He，N_2		10^{-6}	—		
截面积检测器	cross section detector	所有化合物	非选择性	H_2或He＋3%CH_4	10^5	10^{-8}	良	225	其响应值可以由组成元素的原子的截面积数值来计算，新设计的微体积检测器灵敏度可达3×10^{-11} g·s^{-1}

这对于空心柱的分离是不能容许的。相反，对 FID，由于空心柱可插至喷口，柱后谱带扩张的体积可小于 1μl，通过喷口的氢气和氮气一般共为 $60ml \cdot min^{-1}$左右，按式（7-14）计算，响应时间小于 1ms。从响应时间可以看出 FID 可以直接与空心柱联用，而普通 TCD 即使加尾吹气也不能与空心柱联用。

七、选　择　性

许多检测器是通用型，如氢火焰离子化检测器、热导检测器、截面积检测器、氩离子化检测器、光离子化检测器等，对许多化合物均有输出信号；而另一些检测器仅对一些特定类别的化合物，或含特殊基团的化合物有较大的输出信号，对其他类化合物无输出信号或很小，故称之为选择性检测器；如火焰光度检测器、电子捕获检测器、电解电导检测器等。这类检测器的选择性是待测物质的输出信号与潜在干扰物质的输出信号之比。例如氮磷检测器对含 N、P 的化合物有极大的输出信号，检测限可达（10^{-12}～10^{-14}）$g \cdot s^{-1}$，而对烃类化合物则很小，其比值为 10^2～10^4，也就是说氮磷检测器对烃类化合物的选择性为 10^2～10^4。

此外，电子捕获检测器、火焰光度检测器、电解电导检测器、微库仑检测器等都是具有很好选择性的检测器，这可从表 7-2 选择性指标中看出。这种选择性对含特殊元素的化合物的检出和定量，有很大的实用价值。

表 7-2 所列只是检测器的一般指标，对不同厂家，不同型号的检测器，其性能有所差异。如 Hewlett-Packard 公司 HP5890A 上的 TCD，采用单丝单柱，池腔仅 3.5μl，检测限可达 $4\times10^{-10}g \cdot ml^{-1}$（丙烷）。Varian 公司最新推出脉冲式火焰光度检测器，P 的检测限可达 $10^{-13}g \cdot s^{-1}$；S 的检测限可达 $10^{-12}g \cdot s^{-1}$；对烃的选择性 $m_P/m_C \geqslant 10^5$；$m_S/m_C \geqslant 10^6$[6]。

第三节　常用检测器

一、热导检测器

热导检测器（TCD）是根据组分和载气有不同的热导系数研制而成的。组分通过热导池且浓度有变化时，就会从热敏元件上带走不同热量，从而引起热敏元件阻值变化，此变化可用电桥来测量。热导检测器于 1921 年由 Shakespear 首先研制成功，称 Katharometer（卡他计）[7]。1954 年 Ray 将其用于气相色谱[8]，促进了气相色谱法的发展。通过长期的研究开发，改进了热敏元件、池体结构、温控系统，采用高性能的电子学线路，使热导检测器在灵敏度、线性范围、稳定性和响应速度等方面都有显著的改进。例如铼钨丝和前置放大器的采用，使灵敏度提高了两个数量级；为了降低最小检测量，池腔体积减少至 10μl，使之能用于毛细管柱。Hewlett-Packard 公司的 HP5890A 型热导池为单丝、单柱结构，池腔仅 3.5μl，采用射流元件切换载气和参比气，非常适用于毛细管柱，检测限可达 $4\times10^{-10}g \cdot ml^{-1}$（丙烷）[9]。

由于热导检测器结构简单、稳定性好、线性范围宽、操作简便、灵敏度适宜、定量准确、价格低廉，且对所有可挥发性物质均有信号，又属非破坏性检测器，易与其他仪器联用，因此成为目前应用最广的气相色谱检测器之一。这方面专著可参阅文献[10～12]。

（一）TCD 的结构与测量电路

热导池是由池体、热敏元件构成，与测量电桥组成热导检测器。

1. 热导池的结构

热导池的池体多为圆柱形或方形不锈钢构成。池体钻有孔道，内装热敏元件。按气路流

型分为直通型、扩散型和半扩散型，见图 7-7。

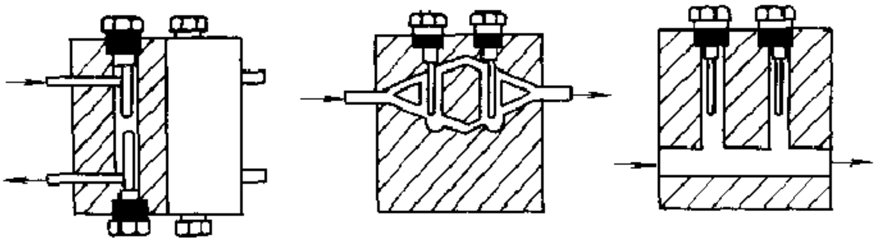


图 7-7　几种类型的 TCD

直通型灵敏度高、响应时间短、但极易受气流影响使噪声增大；扩散型则相反；半扩散型介于两者之间。目前多采用半扩散型。

2. 热导池中的热敏元件

热导池中的热敏元件有热丝型和热敏电阻型两种。目前 TCD 多采用电阻率大、电阻温度系数高、机械强度高、耐高温、对样品浓度变化线性范围宽的热丝型材料。使用最多的是铼钨丝合金。热敏电阻制作的热导池一般作为专用检测器。

3. 测量电路

热导池中热敏元件阻值的变化通过惠斯登电桥的原理进行测量。

热敏元件与电阻联成惠斯登电桥组成热导检测器有两种形式：一种是恒定桥电压或桥电流操作方式；另一种是恒定热敏元件温度操作方式。

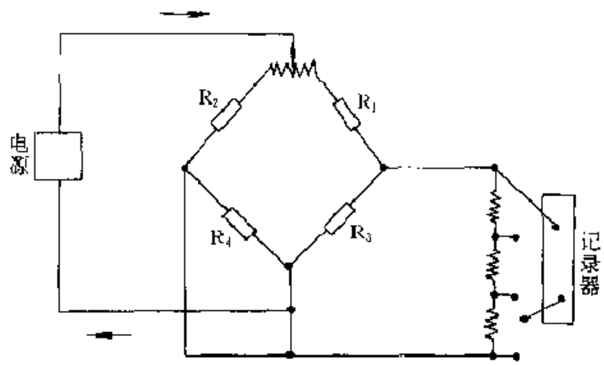


图 7-8　恒定桥电压或恒定桥电流的四臂热导池检测器
R_1 与 R_4 是测量池，R_2 与 R_3 是参比池

恒定桥电压或桥电流操作方式的 TCD 如图 7-8 所示。现在多采用四个电阻值相等的热敏元件组成电桥，电阻 R_1 与 R_4；R_3 与 R_2 分别代表测量池和参比池。载气以一定流量通过测量池和参比池，并且供给恒定的桥电流或桥电压，于是池体温度保持不变，电桥处于平衡状态，输出电压为零。当载气携带组分进入测量池，由于组分与载气的热导系数不同，使测量池中热敏元件的温度发生变化，其阻值也随之改变，而参比池的阻值仍保持不变，此时电桥不平衡，产生输出电压，并把电压信号通过放大器放大后输出给记录器。

恒定热敏元件温度操作方式的 TCD 如图 7-9 所示。由一个作检测用的热敏元件 R_1 和三个固定电阻组成电桥。当载气携带组分进入测量池 R_1 时，同上所述，在电桥 a、b 点产生不平衡电压，此电压经放大器放大并反馈，使电桥的电压和电流都发生变化，以保证热敏元件的温度维持不变，因而热敏元件的阻值也不变，电桥又处于平衡，但是桥电压发生变化，此变化值经放大器放大后输出给记录器。

（二）原理

当载气以一定流速通过稳定状态的热导池时，热敏元件消耗电能产生的热与各因素所散失的热达到热动平衡。造成热散失的因素有载气热传导、热辐射、自然对流、强制对流、热

敏元件两端导线的传导等。但主要是载气的热传导和强制对流，其余可以忽略。当载气携带组分进入热导池时，池内气体组成发生变化，其热导率也相应改变，于是热动平衡被破坏，引起热敏元件温度发生变化，电阻值也相应改变，惠斯登电桥就输出电压不平衡的信号，通过记录器得到组分的色谱峰。热导池产生的输出信号 ΔE 通过推导可得[5]：

$$\Delta E \propto I^3 \frac{\Delta\lambda}{\lambda^2} \qquad (7\text{-}15)$$

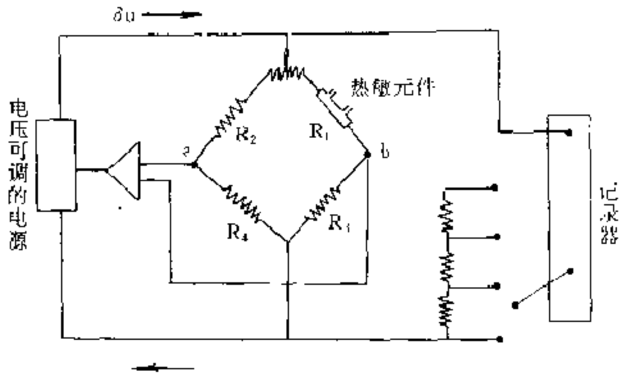


图 7-9 恒定热敏元件温度式热导检测器

式中，I 为电桥总电流，λ 为载气热导率，$\Delta\lambda$ 为组分与载气热导率之差。

（三）操作条件的选择

1. 电桥电流

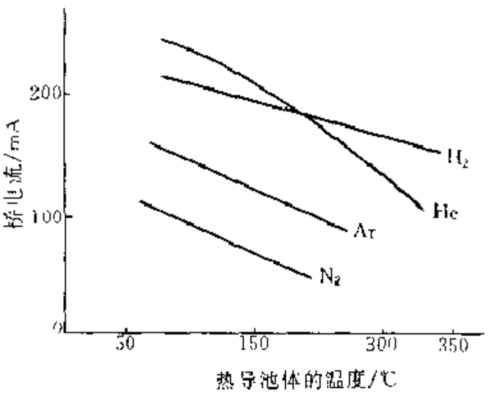


图 7-10 不同载气时不同池体温度情况下允许的桥电流

从公式（7-15）可以看出：热丝型热导池的输出信号 ΔE 与桥电流 I 的 3 次方成正比，故提高 I 是提高 TCD 灵敏度的最主要途径；但 I 值受稳定性及元件寿命限制，桥流过大会引起噪声骤增和热丝氧化。有人从理论上计算过，认为可将使热丝产生（600～700）℃的电流规定为桥流上限。当用氮气作载气时，铼钨丝的桥流上限为 240mA。此外，桥流上限还与池温有关，不同池温，不同载气桥流上限如图 7-10 所示。由图 7-10 可以看出：用 H_2、He 作载气，其桥流可比相同条件下用 N_2 作载气时高近 2 倍，相应输出信号就可以高近 26 倍，所以 TCD 多采用 H_2 和 He 作载气。

2. 载气和载气流速

从公式（7-15）可以看出：当载气的热导率与组分的热导率相差愈大，电桥输出的不平衡电压 ΔE 也愈大，即 TCD 的灵敏度就愈高。从表 7-3 可知，H_2 和 He 的热导率远远大于许多物质的热导率，所以最好选择 H_2 或 He 作载气。选用分子量较小的气体比用 N_2 等重气体的优点，表现为可选用较大的桥电流（见图 7-10）；组分定量线性范围宽（见图 7-11）和不会出现反峰（$\Delta\lambda<0$）。

TCD 为浓度型检测器，载气流速增大，灵敏度随之骤降（见图 7-11），但为了减少池死体积对柱效和响应时间的影响，载气流速每分钟以大于池体积 20 倍以上为好。通常池体积为（0.5～1）ml，所以载气流速多在 15ml • min^{-1}以上。

3. 检测器的温度

TCD 对温度十分敏感。因为池温升高，热丝阻值增加，电流降低会导致灵敏度下降，反之亦然。因此 TCD 对池温的稳定性要求很高。一般温控精度应为±0.1 ℃，较先进的 TCD 温控精度优于±0.01 ℃。此外，从图 7-10 可以看出，池温升高，桥流相应降低，所以池温宜选定与柱温相近或略高几度，这样既可以防止高沸点组分在池内冷凝，又可以保持 TCD 有较高

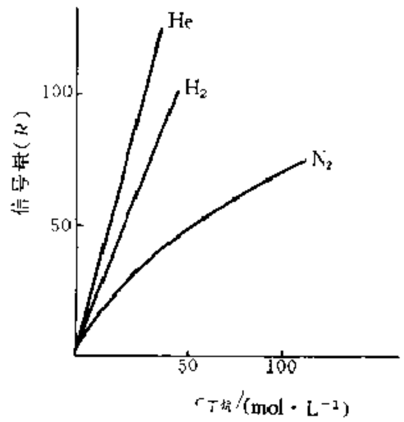
的灵敏度。

表 7-3　一些气体和有机物蒸气的热导率（λ）

单位：cal① /（℃·cm·s）

化合物 \ λ×10⁵ \ 温度/℃	0	100	化合物 \ λ×10⁵ \ 温度/℃	0	100	化合物 \ λ×10⁵ \ 温度/℃	0	100
空气	5.8	7.5	正己烷	3.0	5.0	甲胺	3.8	—
氢	41.6	53.4	正庚烷	—	4.4	二甲胺	3.6	
氦	34.8	41.6	环己烷	—	4.3	乙胺	3.4	—
氮	5.8	7.5	环己烯	2.5	4.7	丙胺	3.0	
氧	5.9	7.6	乙烯	4.2	7.4	三甲胺	3.3	—
氩	4.0	5.2	乙炔	4.5	6.8	二乙胺	3.0	
一氧化碳	5.6	7.2	苯	2.2	4.4	异丁胺	3.0	—
二氧化碳	3.5	5.3	甲醇	3.4	5.5	正戊胺	2.8	—
氧化氮	5.7	—	乙醇	—	5.3	二正丙胺	2.6	—
二氧化硫	2.0	—	丙酮	2.4	4.2	三乙胺	2.7	—
硫化氢	3.1	—	四氯化碳	—	2.2	甲乙醚		5.8
二硫化碳	3.7	—	三氯甲烷	1.6	2.5	甲丁醚	—	5.0
氨	5.2	7.8	二氯甲烷	1.6	2.7	乙丙醚		5.4
甲烷	7.2	10.9	氯化甲烷	2.2	4.0	乙丁醚	—	4.7
乙烷	4.3	7.3	溴化甲烷	1.5	2.6	丙醚	—	1.6
丙烷	3.6	6.3	碘化甲烷	1.1	1.9	异丙醚	—	1.8
正丁烷	3.2	5.6	二氟二氯甲烷	2.0	—	丙丁醚		1.3
异丁烷	3.3	5.8	氯乙烷	2.3	4.1	丁醚	—	4.0
正戊烷	3.1	5.3	溴乙烷	1.7	—	乙酸甲酯	1.6	
异戊烷	3.0	—	碘乙烷	1.4	—	乙酸乙酯	—	4.1

①1cal＝4.1868J。



$c_{丁烷}$/(mol·L⁻¹)

图 7-11　不同载气时丁烷的浓度与信号量的关系

（铂丝热导池，桥电流为 200mA）

4. TCD 的相对响应值

对 TCD 而言，组分的相对响应值 s 只与组分 (i)、标准物 (st) 及载气的性质有关，与池体积、热丝温度、桥电流、元件特性、色谱条件等无关（详见第九章）。因而从理论上讲，其相对响应值 s 是一个通用常数。实际上，只有载气与组分的热传导率相差较大（如 H_2、He），且进样量较小时，s 基本为常数，此时误差一般不会超过 3%。TCD 的相对响应值 s 的测定可参阅第九章。

二、氢火焰离子化检测器

Mcwillan[13]和 Harley[14]等分别于 1958 年研制成功氢火焰离子化检测器（FID）。FID 以氢气和空气燃烧生成火焰为能源，当有机化合物进入火焰时，由于离子化反应，生成比基流高几个数量级的离子[15]，在电场作用下，这些带正电荷的离子和电子分别向负极和正极移动，形成离子流；此离子流经放大器放大后，可被检测。产生的离子流与进入火焰的有机物含量成正比，利用此原理可进行有机物的定量分析。

FID 是高灵敏度的通用检测器，灵敏度可达（10^{-12}～10^{-13}）g·s⁻¹，它对载气流速的波

动不敏感，载气流速在一定范围内波动，峰面积几乎不变；线性范围可高达10^7，又由于FID结构简单，死体积可以小于1μl，响应时间仅1ms，所以不仅可以与填充柱联用，而且也可以直接与毛细管柱联用；它对能在火焰中燃烧电离的化合物都有响应，对同系物的相对响应几乎相同，这给定量带来极大的方便。因此使它成为所有气相色谱检测器中使用最为广泛的一种。

（一）氢火焰离子化检测器的结构

氢火焰离子化检测器由氢火焰电离室和放大器组成，如图7-12所示。

FID的电离室由金属圆筒作外壳，内装有喷嘴，喷嘴附近有一个环状金属环（极化极，又称发射极），上端有一金属圆筒（收集极），两者与90～300V的直流高压相连，形成电离电场。收集极捕集的离子流经放大器的高阻产生信号，放大后输送到记录器或数据处理系统。电离室金属圆筒外壳顶部有孔，燃烧后的废气及水蒸气由此逸出。

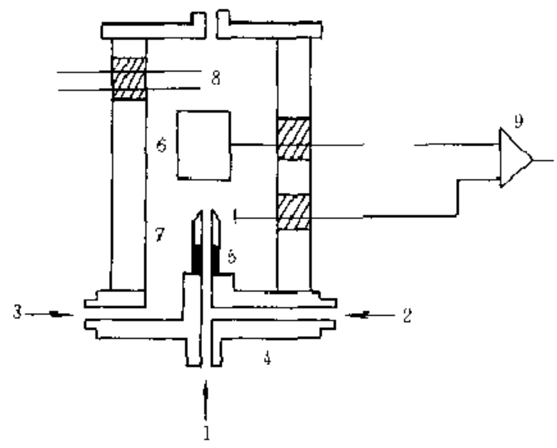


图7-12 氢火焰离子化检测器的结构

1—色谱柱出口；2—氢气；3—空气；4—底座；5—陶瓷管；6—收集极；7—极化极；8—点火器；9—放大器

标准FID的喷嘴用金属制成，内径约0.5mm。发射极、收集极与电离室的金属外壳绝缘电阻值应在$10^{14}\Omega$以上。引线需用屏蔽电缆，金属外壳接地。收集极的形状与发射极的距离，喷嘴内径的大小等对检测器的灵敏度均有影响。通常收集极为内径10mm，长20mm的金属圆筒，电极距离为5mm左右；为了降低热离子产生的噪声，以发射极为正极更好，不点火时基线应平稳。

美国Varian公司近年对FID进行了改进使用加金属帽的陶瓷喷嘴代替标准的金属喷嘴，除有效地消除拖尾，改善分辨率外，还能降低噪音，提高仪器灵敏度。这项改进技术已获美国专利[56]（USP，4999162）。其他改进见文献[57]。

（二）原理

FID是以H_2在空气中燃烧所生成的热量为能源，组分燃烧时生成离子，在电场作用下形成离子流。组分在火焰中生成离子的机理至今仍不十分清楚。早先认为是热致电离；现在化学电离机理为更多的人所接受。人们认为：在火焰中燃烧的碳氢化合物先裂解成$CH\cdot$，$CH_2\cdot$基，然后与氧进行反应生成CHO^+，CH_2OH^+，$COOH^+$，C_2OOH^+，COO^+，CHO_2等离子和电子，火焰中的水蒸气与CHO^+碰撞产生H_3O^+，如

$$CH+O \longrightarrow CHO^++e^-$$

$$CHO^++H_2O \longrightarrow CO+H_3O^+$$

在电场作用下，CHO^+，H_3O^+等正离子与负电子e^-分别向收集极和发射极移动，形成离子流，经阻抗转化，放大器放大（放大10^7～10^{10}倍）便获得可测量的色谱信号。这种离子化效率很低，一般在0.01%～0.05%，因此提高离子化效率是提高FID灵敏度的最有效途径。上述化学电离机理对非烃类组分的离解，还不能作确切的解释。

（三）操作条件对输出信号的影响

有机化合物在FID产生的输出信号不仅受离子头结构的影响，还受氢气、空气、氮气、柃

测器温度等操作条件的影响。

1. 氢气流速的影响

氢气作为燃烧气与载气混合后进入喷咀燃烧，当载气中有机化合物含量不变，氢气流速的改变与有机化合物输出信号的关系如图 7-13 所示。从此图可知，通常氢气的最佳流速为(40～60) ml·min^{-1}。

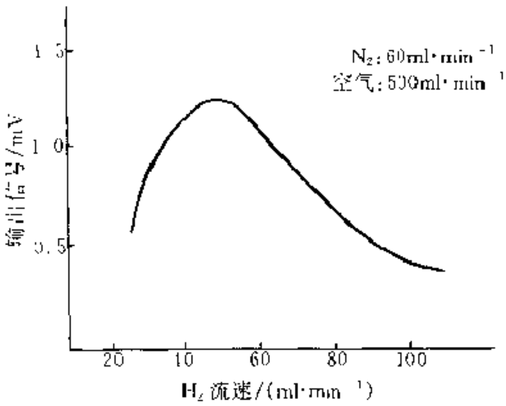


图 7-13 H_2流速的效应

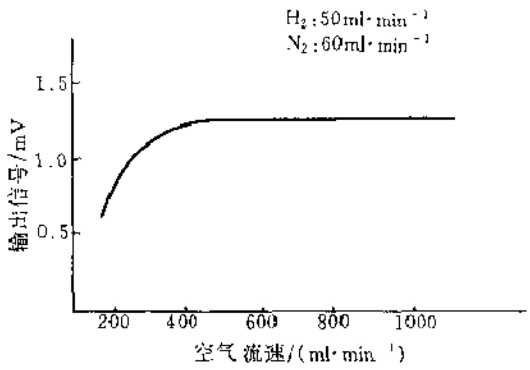


图 7-14 空气流速的效应

2. 空气流速的影响

空气是助燃气，为生成CHO^+提供O_2，同时还是燃烧产物H_2O和CO_2的清扫气，其流速改变的影响如图 7-14 所示。空气的最佳流速须大于 300ml·min^{-1}，和空气与氢气量的比约为 10。

3. 氮气流速的影响

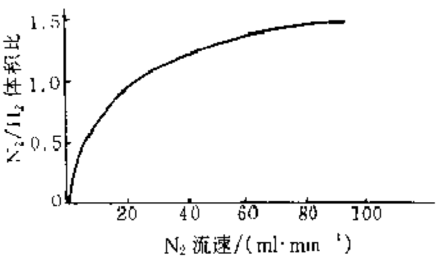


图 7-15 最佳N_2/H_2比

在我国多用N_2或H_2作载气(用H_2作载气时，N_2作色谱柱后的吹扫气进入 FID)，进入 FID 的N_2与H_2的体积比及N_2流速对输出信号是有影响的。从图 7-15 及图 7-13 可知，N_2与H_2的最佳比为 1～1.5 及相应的N_2最佳流速。最近有文献报道，加一定比例的NH_3，可增加输出信号[16]。

4. 检测器温度的影响

增加 FID 的温度，会增大输出信号和噪声[17]；相对而言，FID 的温度不是主要的影响因素。一般是将检测器的温度比柱温设定稍高些，以保证样品在 FID 中不冷凝，但 FID 的温度不可低于 100℃，以免水蒸气在离子室内冷凝。

(四) 相对响应值

几乎所有的有机化合物在 FID 上都有输出信号。对于烃类化合物，由于其相对响应值都很接近(许多情况下可不用相对响应值，但甲烷与苯除外)，且线性范围高达10^7，所以用 FID 对烃类化合物进行定量分析十分方便。对

表 7-4 部分 FID 无输出信号的物质

He	Ne	Ar	Kr	Xe
O_2	N_2	CO	CO_2	H_2O
SiF_4	$SiHCl_3$	$SiCl_4$	SO_2	H_2S
NO	NO_2	CS_2	NH_3	HCl

于含氧、硫、氮、卤素等杂原子化合物，因为相对响应值彼此相差很大，进行定量分析时就必须用相对响应值作峰面积定量校正，详细可参考第九章定量部分。

对于不能形成 $CH^{\cdot}$，$CH_2^{\cdot}$，$CH_3^{\cdot}$ 游离基的物质，在 FID 上无输出信号（见表 7-4），实际分析时常利用 FID 对这些物质无输出信号的性质，选其作样品的萃取剂、稀释剂。其中 CS_2 和 N_2 最常被选用。

三、火焰光度检测器

Brady 等首先将火焰光度检测器（FPD）用于气相色谱法[18,19]。这是分析含 S、P 化合物的高灵敏度、高选择性的气相色谱检测器。广泛用于环境、食品中 S、P 农药残留物的检测。当含 S、P 的化合物在富氢焰（H_2 与 O_2 体积比>3）中燃烧时，伴有化学发光效应，分别发射出（350～480）nm 和 480～600nm 的一系列特征波长光；其中 394nm 和 526nm 分别为含 S 和含 P 化合物的特征波长。光信号经滤波、放大，便可得到相应的谱峰。以前一直将 FPD 作为 S 和 P 化合物的专用检测器，后由于氮磷检测器（NPD）对 P 的灵敏度高于 FPD，而且更可靠，因此 FPD 现今多只作为 S 化合物的专用检测器。

（一）FPD 的结构

FPD 的结构如图 7-16 所示。可分为气路、发光和光接收三部分。气路与 FID 相同，但也有采用空气从喷嘴中心流出，氢气和氮气预混合后从喷嘴周围流出。这是单火焰的气路结构，其缺点是大量烃类化合物与含 S、P 的化合物同时流出时，由于火焰条件的短暂改变和火焰区内产生不利于激发态生成的碰撞与反应，会使光发射产生猝灭效应（响应值因此降低），甚至灭火，所以目前广泛采用双火焰结构，如图 7-17 所示[20]；其优点是：各种有机物在第一个火焰中（富氧焰）充分燃烧，生成 CO_2、H_2O、SO_2 和 P_2O_5，而后所有燃烧产物进入第二个火焰（富氢焰），CO_2 和 H_2O 无效应，SO_2、P_2O_5 被氢还原发光。因此双火焰可消除烃类化合物的干扰，选择性得到提高。

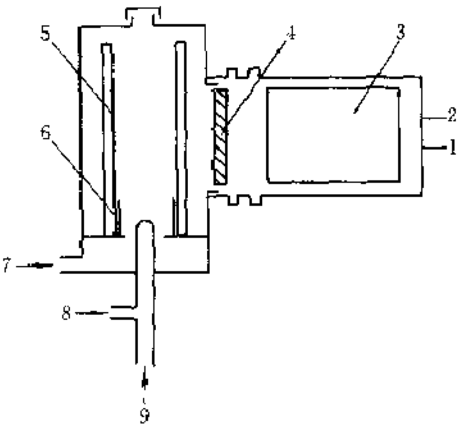


图 7-16　FPD 结构示意图

1—高压电输入；2—信号输出；3—光电倍增管；4—滤光片；5—石英玻璃管；6—遮光罩；7—空气入口；8—氢气入口；9—载气入口

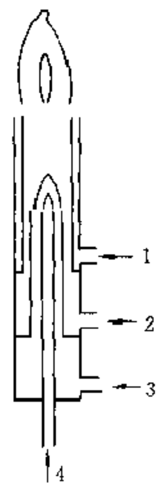


图 7-17　双火焰喷嘴示意图

1—上火焰空气入口；2—氢气入口；3—下火焰空气入口；4—载气入口

发光部分有火焰喷嘴、遮光罩、石英管、喷嘴由不锈钢制成，内径比 FID 大。单火焰喷

嘴内径为（1.0～1.2）mm。双火焰的下喷嘴内径为（0.5～0.8）mm，上喷嘴内径为（1.5～2.0）mm。遮光罩高（2～4）mm，用于阻隔火焰的发光，降低本底噪音。石英管主要用于保证发光区在中心位置，提高光强度，并且有保护滤光片的隔热作用和防止有害物质对FPD内腔及滤光片的污染和腐蚀。

第三部分是光接收部分，包括滤光片，光电倍增管。滤光片的作用是滤去非S、P发出的光信号。通过滤光片的光信号，由光电倍增管转换为电信号，将倍增放大后的电信号送人记录器。

（二）原理

在富氢焰中，氢气在高温下分解，

$$H_2 \rightleftharpoons H+H$$

含硫化合物（RS）首先被氧化成SO_2，然后被H还原成S原子，

$$RS+2O_2 \longrightarrow SO_2+CO_2$$

$$SO_2+4H \longrightarrow S+H_2O$$

在外围冷焰区（约390℃）经以下反应生成激发态S^*：

$$S+S \longrightarrow S_2^*$$

$$H+H+S_2 \longrightarrow S_2^*+H_2$$

$$H+OH+S_2 \longrightarrow S_2^*+H_2O$$

$$S+S+M \longrightarrow S_2^*+M$$

其中，M为气体分子。激发态S_2^*分子返回基态时产生（350～430）nm的光谱，

$$S_2^* \longrightarrow S_2+h\nu(350\sim430)\text{nm}$$

对于含磷化合物，则是先被氧化成磷的氧化物PO，然后被H还原成激发态HPO^*，可产生（480～600）nm的光谱：

$$PO+H \longrightarrow HPO^*$$

$$HPO^* \longrightarrow HPO+h\nu(480\sim600)\text{nm}$$

（三）操作条件的影响

氮气（载气）、氢气和空气流速的变化直接影响FPD的灵敏度、信噪比、选择性和线性范围。氮气流速在一定范围变化时，对P的检测无影响。对S的检测，表现出峰高与峰面积随氮气流量增加而增大；继续增加时，峰高和峰面积逐渐下降。这是因为作为稀释剂的氮气流量增加时，火焰温度降低，有利于S的响应，超过最佳值后，则不利于S的响应。无论S还是P的测定，都有各自最佳的氮气和空气的比值，并随FPD的结构差异而不同。测P比测S需要更大的氢气流速。

极性的含S化合物容易被各种固体表面（金属管壁、载体表面）吸附。分析二氧化硫、硫化氢、甲硫醇等低分子硫化物时，甚至须采用全聚四氟乙烯系统。

（四）PFPD

美国Varian公司最近推出的脉冲式火焰光度检测器（PFPD）在检测技术上有新突破[1]，结构如图7-18所示。独特的脉冲火焰设计为检测S、P、N化合物提供了最佳的选择性和灵敏度。空气和氢气的消耗也比标准的FPD降低10倍，比化学荧光检测器降低20倍。并且解决了FPD的淬火问题。

PFPD包括点火源和燃烧气流。由于燃烧气流量不足，所以不能维持连续火焰。工作时，燃烧的火焰扩散到检测器，使样品燃烧，在可燃混合物消耗完后，火焰熄灭，产生脉冲光辐

射。使用特殊的电子设备和适当的S、P和N过滤器，就可以在元素发射过程中观察到信号，从而提供最佳的选择性和检测限。

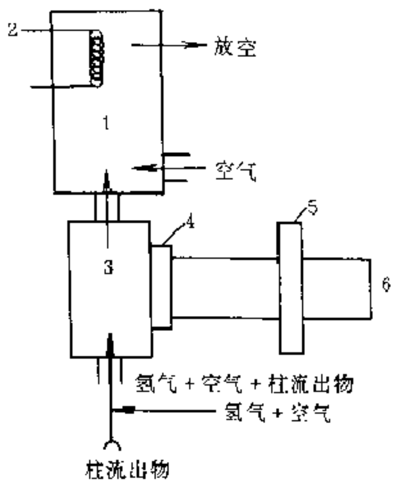


图 7-18　PFPD 示意图

1—点火室；2—点火器；3—燃烧室；4—窗口；5—过滤器(S、P或N)；6—光管

四、氮磷检测器

氮磷检测器（NPD）是由热离子化检测器（TID）发展而来[22~25]。1961 年 Cremer 等[26]最初研制的火焰热离子化检测器是由氢火焰将样品离子化并加热碱源，碱源是可挥发的碱金属（为溴化铯、氟化钠等）。因其易挥发，寿命短，检测器的灵敏度难以保持稳定；线性范围也较窄，所以没有商品化的价值。1974 年 Kolb 等[27]人首先研制成可以测N、P化合物的NPD。碱源采用不易挥发的铷珠（碳酸铷和二氧化硅烧结而成的硅酸铷珠），用白金丝作支架，寿命近4h。

由于NPD对含N、P的有机物的检测具有灵敏度高，选择性强，线性范围宽的优点[28]，它已成为目前测定含N有机物最理想的气相色谱检测器；对含P的有机物，其灵敏度也高于FPD，而且结构简单，使用方便；所以广泛用于环境、临床、食品、药物、香料、刑事法医等分析领域，成为最常用的气相色谱检测器。目前几乎所有的商品色谱仪都装备这种检测器。

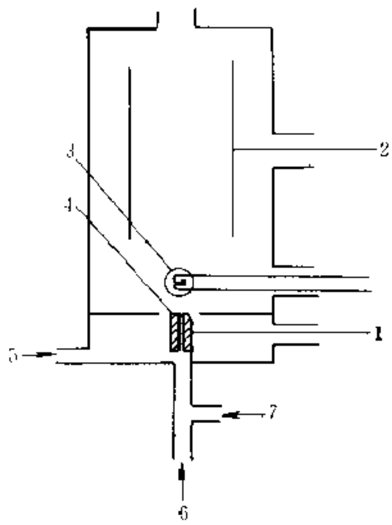


图 7-19　NPD 结构示意图

1—喷口接线；2—收集极；3—碱盐珠；4—喷嘴；5—空气入口；6—载气入口；7—氢气入口

（一）NPD 的结构

NPD 的结构与操作因产品型号而异，典型结构如图 7-19 所示。

NPD 与 FID 的差异只是前者在喷口与收集极间加一个碱源——铷珠。铷珠约（1～5）mm^3，可取出更换或清洗。其操作方式有两种：

1. 氮磷型操作

此为主要操作方式，如图 7-20（a）所示，喷嘴不接地，供给的空气和氢气量较小 [$V_{air}<150ml\cdot min^{-1}$，$V_{H_2}<(4\sim9)\ ml\cdot min^{-1}$]，喷嘴不着火，氢气上升到被低电压，恒电流加热至红热的铷珠周围，在珠的周围形成冷焰，含N、P的有机物在此发生裂解和激发反应，而烃类化合物不会被燃烧掉，从而形成N、P的选择性检测，其选择性可高达 $10^2\sim10^4$（指含N、P化合物的输出信号与碳氢化合物输出信号之比）。

2. 磷型操作

如图 7-20（b）所示，喷嘴接地，铷珠用正常FID的火焰加热至发红 [$V_{H_2}=(50\sim60)\ ml\cdot min^{-1}$，$V_{air}\approx300ml\cdot min^{-1}$]，烃类化合物在火焰上燃烧，产生的信号被导入大地，而含P的化合物被铷珠激发，形成P的选择性检测，但含P化合物的谱峰一般呈现拖尾现象，有文献报道，可在碱源表面涂 Al、Rb 粉改善峰形[29]。

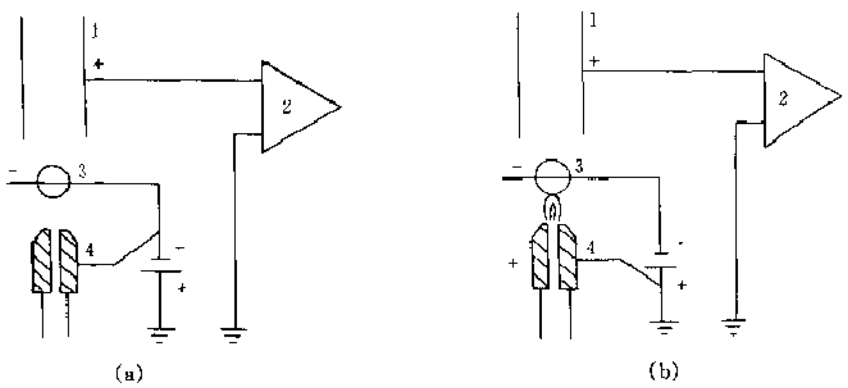


图 7-20 NPD 操作方式

1—收集极；2—放大器；3—碱盐珠；4—喷嘴

(a) 喷嘴不接地；(b) 喷嘴接地

通常第二种操作方式所用的喷嘴内径比第一种稍小，若喷嘴不接地，铷珠卸掉则成为通用的 FID。

（二）原理

对 NPD 的检测机理有不同的解释[30~33]。Kolb 的气相离子化理论认为铷珠被火焰加热后，挥发出激发态的铷原子，铷原子与火焰中各种基团反应生成 Rb^+，Rb^+ 被负极铷珠吸收还原，维持铷珠的长期使用，火焰中各基团获得电子成为负离子，形成本底基流。当含 N 的有机物进入铷珠冷焰区，生成稳定氰游离基 $\cdot C\equiv N|$。

$$-\overset{|}{\underset{|}{C}}-\bar{N} \xrightarrow[\text{冷焰区}]{(700\sim900)^\circ C} \cdot C\equiv N|$$

氰游离基从气化铷原子上获得电子生成 Rb^+ 与氰化物负离子。

$$Rb^* + \cdot C\equiv N| \longrightarrow Rn^+ + [|C\equiv N|]^-$$

负离子在收集极释放出一个电子，并与氢原子反应生成 HCN，同时输出组分信号。含 P 有机物也有相似的过程。

$$|\cdot P=O\rangle + e\cdot \longrightarrow [\langle P=O\rangle]^-$$

$$\langle O=\cdot P=O\rangle + e\cdot \longrightarrow [\langle O=\bar{P}-\underline{\bar{O}}|] \rightleftharpoons [|\underline{O}-P=O\rangle]^-$$

（三）操作条件的影响

加热电流、极化电压、气体流速对 NPD 的响应都有影响。

1. 极化电压的影响

与 FID 相似，电压增加，输出信号也增加，电压绝对值大于 −180V 时，响应值基本不变。

2. 铷珠温度的影响

加热电流决定铷珠的表面温度，当温度<600 ℃时，输出信号很小。温度升高，输出信号相应增加。一般调至（700～900）℃为宜。温度过高，基流和噪声迅速增加，铷珠寿命也会锐减。

3. 空气流量的影响

空气流量增加，铷珠表面温度降低，输出信号相应降低。在 N-P 型操作时，$V_{air}<150ml\cdot min^{-1}$；P 型操作时，$V_{air}\sim300ml\cdot min^{-1}$。

4. 氮气流量的影响

氮气流量过高，铷珠表面温度降低；氮气流量过低不利于组分参加反应，这会使响应值降低，所以须通过实验选定最佳值。

5. 氢气流量的影响

氢气流量增加可以增加冷焰区反应的机率，铷珠温度也会提高，因此氢气流量稍有增加，输出信号会成倍增加。但必须小于最低着火流量。在 N-P 型操作时，维持无焰条件，一般 $V_{H_2}<10ml\cdot min^{-1}$。

（四）化合物结构与响应值

NPD 在测含 N 化合物上显示出特殊的优越性，可以认为是气相色谱检测器中唯一可选择性地测量含 N 化合物的检测器。

含 N 化合物的响应值与结构有以下顺序关系：

—N═N—＞—CN ＞ 氮杂环 ＞ 芳香胺 ＞ 硝基化合物 ＞ R—NH₂ ＞R—C(═O)—NH₂

五、电子捕获检测器

Pompeo 和 Otvos 曾用电离辐射检测出气体[34]，其后 Deal 等人首先将放射性离子化检测器用于气相色谱[35,36]；1958 年 Lovelock 设计了氩离子化检测器[37]，并进一步发展成电子捕获检测器［ECD］[38,39]。ECD 是一种灵敏度高，选择性强的检测器。灵敏度高是指其对电子系数大的物质检测限可达（$10^{-12}\sim10^{-14}$）g；而选择性强是指它只对具有电负性的物质，如含 S、P，卤素的化合物、金属有机物及含羰基、硝基、共轭双键的化合物有输出信号，而对电负性很小的化合物，如烃类化合物，很小或没有输出信号。如对 CCl_4 的灵敏度就比对正己烷高出三个数量级。因此 ECD 是分析痕量电负性化合物最有效的检测器，也是放射性离子化检测器中应用最广的一种。被广泛用于生物、医药、农药、环保、金属螯合物及气象追踪等领域。

（一）ECD 的结构

多采用圆筒同轴电极式结构，如图 7-21 所示。其收集极用陶瓷、聚四氟乙烯或玻璃与池体绝缘，绝缘电阻大于 500MΩ。放射源用 ^3H 或 ^{63}Ni，它们的性能见表 7-5。

从表 7-5 可以看出：与 ^{63}Ni 相比，^3H 的 β 射线能量低、射程短，是较理想的放射源。通常是将其吸附在金属钛上，以不锈钢为极基，称氚钛板。由于 ^3H 的使用温度不得超过 220 ℃，因此高温情况下只能采用灵敏度稍低的 ^{63}Ni。

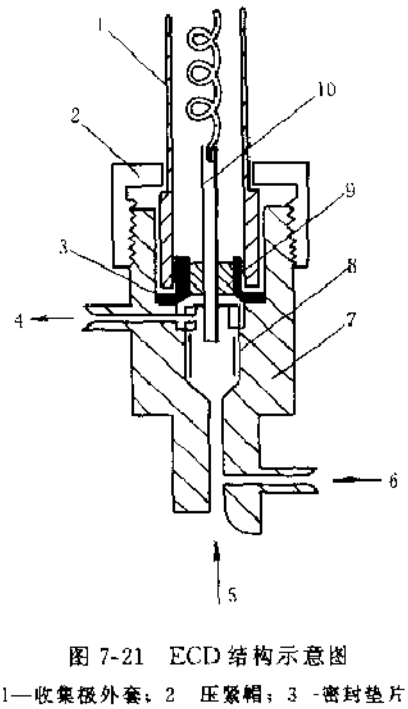


图 7-21　ECD 结构示意图

1—收集极外套；2—压紧帽；3—密封垫片；4—出气口；5—载气入口；6—尾吹气入口；7—池体；8—放射源；9—绝缘陶瓷；10—收集极

收集极兼作正的极化极，放射源接地，池体一般很小，如岛津 GC-9A 上 ECD 的内径为 10mm，高 10mm，与毛细管柱膜用的 ECD 池体更小，一般采用同轴位移式的池体结构[40]。

表 7-5 放射源的特性

放射源	射线	使用剂量/GBq	最大能量/MeV	标准状况下空气中射程/cm	最高使用温度/℃	半衰期/a
^3H	β	3.7～37 (100～1000)①	0.018	0.5～1.0	200	12.5
^{63}Ni	β	0.37～1.11 (10～30)①	0.067	4.5	400	85

①括号内为以 mCi 为单位的数值。

美国 Hewlett-Packard 公司新设计的 ECD，在池体下部内表面镀镍，减少高灵敏物质的吸附和降解。对阳极采用吹扫，使池体上部无样品凝积。从而延长池寿命，并能与毛细管柱联用。

（二）原理

ECD 室内的放射源（^3H 或^{63}Ni）能放出初级电子、β 射线，在电场加速作用下向正极（收集极）移动，与载气（N_2 或 Ar）碰撞，产生更多的次级电子和正离子：

$$Ar+\beta \longrightarrow Ar^{+}+e$$

$$N_2+2\beta \longrightarrow 2N^{+}+2e$$

在电场作用下，分别趋向极性相反的电极，形成本底电流，或称基流（$I_0 \approx 10^{-9}A$）。当电负性组分 AM 进入电场，捕获场内电子，形成分子离子：

$$AM+e^{-} \longrightarrow (AM)^{-}+能量（非离解型）$$

或

$$AM+e^{-} \longrightarrow A+M \ \pm能量（离解型）$$

$$AM+e^{-} \longrightarrow A^{-}+M^{+}\pm能量$$

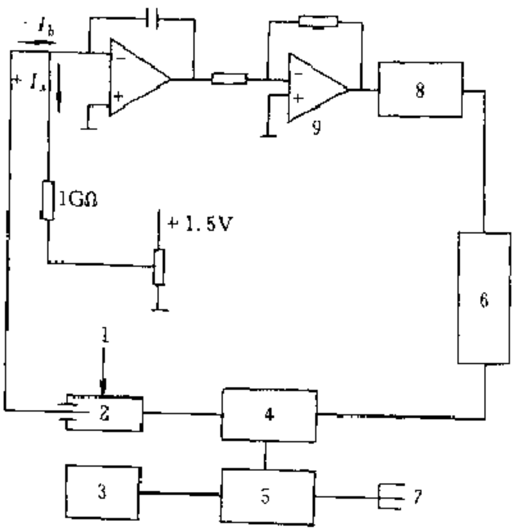


图 7-22 恒流调制电源线路框图

1—样品进入；2—检测器；3—信号记录；4—脉冲形成器；5—频率电压变换器；6—电压频率变换器；7—补偿；8—电平变换器；9—反相器

非离解型捕获过程多发生在检测器较低温度的条件下，而离解型则多发生在温度较高的情况下。

负离子质量大、运动慢于电子，向正极移动过程有机会与正离子（Ar^+或 N^+）“复合”，生成中性分子，被载气带出检测器。“复合”作用使基流下降，于是出现基流下降的反峰信号。所以 ECD 的信号都是反峰信号。

检测信号电流 I（引入电负性组分后剩余的电流）与被测组分浓度 C 的关系为

$$\frac{I_0-I}{I}=K'C \qquad (7\text{-}16)$$

由于线性范围窄（10^1～10^2），ECD 已很少采用直接供电和脉冲供电方式。国外仪器全部采用恒流调制脉冲供电，线性范围可达 10^4。电路示意图见图 7-22。该电源采用频率 f 的变化 Δf（几十至几百万赫兹），自动平衡检测室内电子数 e 的变化，以保持电流 I 恒定：

$$\Delta f=f-f_0=KC \qquad (7\text{-}17)$$

式中，f_0 为基始频率；C 为样品浓度；K 为系数。Δf 值经频率-电压转换成 Δf，放大后输出

信号。从（7-17）式可以看出：ECD 的输出信号是与检测室内组分的浓度成正比，所以 ECD 是浓度型检测器。

（三）操作条件的选择

1．载气和载气流速

ECD 一般采用 N_2 作载气，也可以使用 Ar+5%～10%CH_4 或 N_2+5%CO_2。CO_2 和 CH_4 的加入是为了降低检测器内电子的能量。

载气必须严格纯化，彻底除水和氧。因为水和氧的存在会降低基流，影响 ECD 的灵敏度。可以采用脱氧剂使 O_2 的含量（体积分数）低于 10^{-8}，用硅胶和分子筛联合脱水。系统微小的泄漏也会使基流降低以至消失。所以确保系统净化和不泄漏是使用 ECD 的必要条件。

载气流速增加，基流随之增大，N_2 在 100ml・min^{-1}左右，基流最大。为了获得较好的柱分离效果和较高基流，通常采用在柱与检测器间引入补充的 N_2，以便检测器内 N_2 达到最佳流量（这种补充气还可以清洗检测器，所以又称清洗气）。ECD 是浓度型检测器，清洗气同时会稀释组分浓度，因而在流量的选择上要两者兼顾。

2．检测器的使用温度

温度对灵敏度的影响与检测组分的反应过程有关。当电子俘获机理为非离解型时，温度升高会降低 ECD 的灵敏度。当机理为离解型时，由于分子解离需要能量，所以温度升高，ECD 的灵敏度亦增加。

为了获得较稳定的基流，还要求检测器有较高的控温精度（$\Delta T<\pm 0.1$ ℃）。

ECD 是放射性检测器，检测器的温度受放射性污染的限制。1964 年美国原子能委员会宣称：在空气中^{3}H 的剂量超过 $2\times10^{-7}\mu Ci\cdot cm^{-3}$（$7\times10^{-3}Bq\cdot cm^{-3}$）对人体有害[41]。从表 7-6 可以看出：ECD 流出的^{3}H 量即使在 200 ℃操作时，也远远超过以上规定。因此建议将 ECD 的尾气导入通风橱或室外。使用^{3}H 源的 ECD 时，严禁检测器的使用温度高于 220 ℃或不通气就升温。

表 7-6　不同 N_2 流速及不同温度下 ECD 中^{3}H 的逸出量

温度/℃	N_2 流速/$ml\cdot min^{-1}$	^{3}H 逸出量/$kBq\cdot h^{-1}$	流出物中^{3}H/$Bq\cdot ml^{-1}$	温度/℃	N_2 流速/$ml\cdot min^{-1}$	^{3}H 逸出量/$kBq\cdot h^{-1}$	流出物中^{3}H/$Bq\cdot ml^{-1}$
230	56	1559	463	190	58	79	22.6
230	130	1432	179	190	130	79	10.1
210	58	401	115	172	59	21	5.9
210	130	369	47	172	128	23	3.0
201	57	217	64	142	57	2	0.7
201	128	236	30.8	142	133	2	0.2

由于不断要求 ECD 在高温下使用，从表 7-5 可以知道^{63}Ni 是较理想的放射源，它是衰变中没有 γ 辐射的低能量的 β 放射源。放射核体是高熔点金属，所以它不仅最高使用温度可达 400 ℃（特殊设计可达 450 ℃），而且排放上远比^{3}H 安全。目前绝大多数 ECD 都采用^{63}Ni 作放射源。

3．极化电压

极化电压对基流和响应值都有影响，选择基流等于饱和基流值的 85%时的极化电压为最佳极化电压。直流供电时，为（20～40）V；脉冲供电时，为（30～50）V。

4．脉冲周期和宽度

最佳脉冲周期一般为（50～100）μs，脉冲宽度为（0.5～5）μs。

5. 固定液的选择

为保证 ECD 正常使用，必须严防其放射源被污染。源污染主要来自样品与固定液。须特别防止样品中难挥发组分在柱内累积。因为一旦从柱后流出，就会污染放射源。色谱柱的固定液必须选择低流失、电负性小的，柱子必须充分老化后才与 ECD 联用。表 7-7 是用 ECD 时、某些固定液的最高使用温度及老化条件。

表 7-7 ECD 对部分固定液的使用条件

固定液	老化条件		最高工作温度/℃	
	温度/℃	时间/h	FID	ECD
鲨鱼烷	105	16	100	100
阿匹松真空脂	200	16	250	150
SE-30	280	16	350	210
OV-17	280	16	300	200
聚丁二酸乙二醇酯	200	16	200	110
PEG-20M	200	16	200	110
β，β'-氧二丙腈	70	16	65	≤环境温度
三甲苯基磷酸酯	115	16	150	80
邻苯二甲酸二癸酯	150	16	175	70

6. 安全保障

ECD 是放射性检测器，必须严格执行放射源使用、存放管理条例。拆卸、清洗应由专业人员进行。尾气必须排放到室外，严禁检测器超温。

（四）ECD 的相对响应因子

ECD 的操作条件[43]，检测器的结构[14]与尺寸[44]，放射源的种类，载气的种类和流速，极化电源的供电方式，样品的导入方式[45]等对其输出信号值都有影响。因此文献提供的相对响应值一般只可供参数，不宜作定量的根据。

许多文献给出各种化合物在 ECD 上的相对电子吸收系数。Davanx 认为：电子吸收系数与响应值之间有如下关系[46]。

$$\mathscr{K}=\frac{K_i}{K_s}=\frac{A_iC_s}{A_sC_i}$$

式中，$\mathscr{K}$ 是相对响应因子；K_i、A_i、C_i 是组分 i 的电子吸收系数、峰面积和浓度；K_s、A_s、C_s 是参比物的电子吸收系数、峰面积和浓度。从组分的电子吸收系数可以定量算出其相对响应因子，从而对峰面积进行校正。

（五）新型的 ECD

ECD 的主要缺点是采用放射源产生电子，从而造成污染。新开发的 ECD 是用胺在远红外照射下，相互作用产生电子[47]；或 He 在高压脉冲下产生电子[48]，称为脉冲放电电子俘获检测器（PDECD），其操作条件类似脉冲放电发射检测器（PDED），其检测限可达亚 fg 级。可参阅文献［19、50］。

通用的 ECD 都采用恒流源，固定频率的 ECD（FF-ECD）和化学激活型的 ECD（CS-ECD）也被用于特殊目的的分析[51]。

第四节 其他类型检测器

一、光离子化检测器

光离子化检测器（PID）对大部分的有机物都有响应。它是利用密封的 UV 灯发射的紫外

线，使色谱柱流出的电离电位低于紫外线能量的分子电离。灯的强度为（8.3～11.7）eV，最广泛采用的是10.2eV的灯。在电场作用产生电信号。检测限为ng・g⁻¹级，线性范围可达10⁷。PID只使用一种载气（空气），无需其他辅助气体，灵敏度接近FID，并很容易与毛细管柱联用[52]。由于它对S的灵敏度很高，对CH_4无输出信号，因此在环保和药物分析中引起人们极大的兴趣。在检测器联用中，由于FID与PID对脂肪族和芳香族化合物响应值不同，可以用其信号的比值来鉴别不同族的化合物。同样PID与NPD的联用，可用于检测伯、仲、叔胺化合物。

二、霍尔微电解电导检测器[53]

霍尔微电解电导检测器（HECD或Hall D）是对N、P和卤素化合物高灵敏度的专用检测器。其线性范围和选择性可以和NPD、FPD、ECD媲美。

化合物经色谱分离后进入反应炉，在高温催化作用下发生反应，生成小分子化合物，经涤气器除去干扰组分，再进入电导池，在电导池中发生电离反应，从而改变电导池的电导值，输出电信号，达到检测元素的目的。Hall D按N方式工作时，可用来测定农药和除莠剂的残留量。按S方式工作时，其线性范围优于FPD，并且没有单焰FPD的熄灭问题。按卤素方式工作时，其选择性和线性范围都可达10^6，可以取代ECD分析有机氯农药。由于Hall D是湿式化学式检测器，远不如FPD、NPD、ECD方便，因此应用受限制。近年SRI公司开发一种新型的干式电导检测器（DELCD™），其最低检测限比湿式电导器稍好[54]，使用更方便，适宜推广。

三、热能量分析检测器

热能量分析器（TEA）是一种分析食品、饮料中亚硝胺的专用检测器，也被用于分析芳香族硝基化合物，炸药和胺类化合物。最低检出限为10^{-14}g・s^{-1}。

四、微波等离子体检测器

微波等离子体检测器（MPD）是利用微波等离子体激发化合物，使所含元素产生特征光谱，经分光系统和光电转化后，输出电信号，能同时检测多种元素。适用于检测农药残留、大气、食品、血液和残渣中的有毒物质和其他环保分析。可同时检出C、H、D、O、N、F、Cl、Br、I、S、P等元素。线性范围为10^3～10^4；最低检出限为（10^{-9}～10^{-10}）g・s^{-1}。

五、离子淌度检测器

离子淌度检测器（IMD）的灵敏度比FID和PID高，近似于ECD，而且可以提供多种响应模式，成为高灵敏度、高灵活性的选择性检测器[55]。

参 考 文 献

1 Halasz I. Anal Chem, 1964; 36: 1428

2 Eiceman G A, Hill H H, jr, Davani. B. Anal Chem, 1996; 68: 297R

3 Hill H H, Mc Minn D G. In Hill H H, Mc Minn D C, ed. Detector For Capillary Chromatography. Chapter 1. New Yrok: John Wiley & sons Inc, 1992

4 Dimbat M, Porter P E, Stross F H. Anal Chem, 1956; 28: 290

5 李浩春，卢佩章. 气相色谱法. 北京：科学出版社，1993

6 国外分析仪器动态，995；(2)：88
7 Shakespear G A. Proc Phys Soc，1921；33：163
8 Ray N H. J Appl Chem (London)，1954；4：82
9 沈小婉. 色谱法在食品分析中的应用. 北京：北京大学出版社，1992
10 David D J. Gas Chromatoraphic Detectors. New York：John Wiley & Sons Inc，1974
11 Daynes H A. Gas Analysis By Measrement of Thermal Conductivity. Cambridge Univ Press，1933
12 Littlewood A B. Gas Chromatography. 2nd ed. New York：Acadmic，1966
13 Mc Willian I G，Dewar R A. In Desty D H ed. Gas Chromatography 1958. London：Butterworth，1958：142
14 Harley J，Nel W，Pretorius V. Nature，1958；181：177
15 Mc Willian I G. Chromatographia，1983；17：241
16 Abdel-Rehim M，Zhang L，Hassan M. HRC，1994；17：723
17 Dressler M，Ciganek M. J Chromatogr A，1994；679：299
18 Brody S S，Chaney J E. J Gas Chrom，1966；4：42
19 Bowman M，Beroza M. Anal Chem，1968；40：1448
20 周良模等. 气相色谱新技术. 北京：科学出版社，1994
21 Amirav A，Jing H. Anal Chem，1995；67：3305
22 Karmen A，Ginffrica L. Nature，1994；1204
23 Aue W A，Gehrke C W，Tindle R C，et al. J Gas Chrom，1967；5：381
24 Ginffrida L，Ives F. J Assoc Off Agr Chemists，1964；47：1112
25 Brazhnikov V V，Gurev M V，Sakodynskii K I. Chromatogr Review (Lerer M，ed)，1970；12：1
26 Cremer E，Kraus T，Bechtold E. Chem Ing Tech，1961；33：632
27 Korb B，Bischoff J. J Chrom Sci，1974；12：625
28 Watabe K. Omoya K. Jpn Kokai Tokkyo Koho JP 0720112 [9520112] 24 Jan 1995，Appl 93/190895，02 Jul 1993
29 Draper W M. J Agric Food Chem，1995；43：2077
30 Kolb B，Aner M，Pospisil P. J Chrom Sci，1977；15：53
31 Burgett C A，Smith D H，Bente H B. J Chromatogr，1977；134：57
32 Brazhnikov V V. J Chromatogr，1976；122：527
33 Olan K，Szoke A，Vajta Zs. J Chrom Sci，1979；17：497
34 Pompeo D J，Otvos J W. US Patent，1953；(2)：641710
35 Deal C H，Otvos J W，Smith V N，et al. Anal Chem，1956；28：1958
36 Boer H. In Desty DH. ed. Vapour Phase Chromatography. London：Butterworth，1957：169
37 Lovelock J E. J Chromatogr，1958；1：35
38 Lovelock J E，Lipsky S R. J Am Chem Soc，1960；82：431
39 Lovelock J E. Anal Chem，1961；33：162
40 常理文，竺安. 分析化学，1980；10：210
41 US Atomic Energy Commission. Conditions and Limitations on the General License Provision of 10 CFR 150-20，Rules and Regulation. Washington，D C：Divislon of Materials Licensing，US Atomic Energy Commision，1964
42 Ciganek M，Dressler M，Lang V. J Chromatogr A，1994；668：441
43 Fukushima T，Tanabe S. US Patent 5，317，159，31 May 1994，JP Appl. 92/46，145，31 Jan 1992
44 Singh H，Millier B，Aue W A. J Chromatogr A，1995；689：45
45 Wan H B，Wong M K，Mok C Y. J Chromatogr A，1994；663：123
46 Devanx P. J Gas Chrom，1967；5：341
47 Osato I. Jpn Kokai Tokkyo Koho Jp04，303，759，1992
48 Wentworth W E，D'sa D E，Cai H，et al. J Chrom Sci，1992；30：478
49 Wentworth W E，Cai H，Stearns S. J Chromatogr A，1994；688：135
50 Tian X，Yang W，Yu A，et al. Microchem J，1995；52：139
51 Grimsrud E P. In Hall H H，McMinn D G，ed. Detectors for Capillary Chromatography. Chapter 5. New York：John

Willey & Sons Inc, 1992

52. Driscoll JN, In Hill H H, Mc Minn D G, ed. Detectors For Capillary Chromatography. Chapter4. New York: John Willey & Sons, Inc, 1982

53 Anderson R J, Hall R C. Am Lab 1980; 12: 108

54 Stevenson R. Am lab, 1985; (5): 26G

55 Hill H H, McMinn D G. In Hill H H, McMinn D G, ed. Detectors For Capillary Chromatograpny, Chapter 12. New York: John Willey & Sons, Inc, 1992

56 李茂昌. 现代科学仪器, 1994; 1: 41

57 Berg J R, Hawkins T. Inter Lab, 1992; 9 (5): 10

（叶　芬）

第八章 定性分析

第一节 保留值定性法

气相色谱法可将混合物分离为单独的组分，显示为色谱图中的各个色谱峰；鉴别色谱峰是何种物质，色谱保留值数据定性法是用得最普遍、最方便的方法。

一、直接定性法

在完全相同的色谱分析条件下，比较样品色谱峰和纯组分的流出时间是否相同，或将纯组分加入样品后进行色谱分析，观察哪个色谱峰的高度有变化，均可以直接对色谱峰作出定性的判断。

完全相同的色谱条件常不易获得，因此当某种条件改变了，就要采用相应的其他定性指标鉴别色谱峰。如当载气流速有改变时，就不能用保留时间（t_R）作定性指标，而要用保留体积（V_R）；当死时间（t_M）、死体积（V_M）不同时，就应该将保留时间、保留体积改换为调整保留时间（t'_R）、调整保留体积（V'_R）；当考虑到柱的压力降变化时，则要用压力梯度校正因子（j）进一步改换为校正保留体积（V^0_R）、净保留体积（V_N）。这些定性指标有以下关系：

$$t'_R = t_R - t_M \tag{8-1}$$

$$t^0_R = jt_R \tag{8-2}$$

$$t_N = jt'_R \tag{8-3}$$

$$V_R = F_C \cdot t_R \tag{8-4}$$

$$V'_R = F_C(t_R - t_M) = V_R - V_M \tag{8-5}$$

$$V^0_R = jV_R \tag{8-6}$$

$$V_N = jV'_R \tag{8-7}$$

以上这些定性指标还与固定液用量有关。色谱工作者最后改用比保留值（V_g）作定性指标。组分的比保留值只与固定液的种类及柱温有关，而与载气流速、柱长、固定液用量等操作条件无关。

$$V_g = \frac{V_N}{m_L} \cdot \frac{273.15}{T_C} = V''_g \cdot \frac{273.15}{T_C} \tag{8-8}$$

二、相对保留值定性法

用上述绝对保留值定性时，为了测得重现性很好的保留值，即使是测定 V_g 值，对测定时操作条件仍要求很严格，如要求进样速度、载气流量、柱温等重复不变，这难免有一定困难，且实际工作中欲准确知道柱中固定液质量，也不是易事。

为了减少操作参数波动给定性分析造成的影响，用相对保留值（r）对混合物组分色谱峰定性，就比较有利和方便了，

$$r = \frac{t'_{R_i}}{t'_{R(st)}} = \frac{V'_{R_i}}{V'_{R(st)}} = \frac{V_{g_i}}{V_{g(st)}} = \frac{k_i}{k_{st}} \tag{8-9}$$

组分的 r 值只是柱温、固定相性质的函数，仅由组分的热力学性质决定，与其他操作条件无关。对于比较简单的混合物且其组分大致可以推测，则在获得色谱图后，常可依据实测的相对保留值与文献报道的相对保留值对比，作出对色谱峰的判定，而不必用纯物质对色谱峰进行定性。令人遗憾的是，文献 [1、2] 中相对保留值数据所选用的参比物质不尽相同，这给应用带来诸多不便。对于较复杂的混合物，相邻流出峰之间的差距很小，所测量的保留值有一定误差，此时用相对保留值定性有发生错误的可能性，当然，用作初步的判据还是可行的。

由于不同物质在同一色谱柱上保留值可能相同，此时可用双柱法进行组分定性（选择具有不同极性或氢键缔合能力的色谱柱）。有关双柱定性的详细情况，可参看文献 [3] 和本章第二节的例子。

三、保留指数法

Kov'ats[4] 于 1958 年提出的保留指数，是将组分的保留值用两个分别前后靠近它的正构烷烃来标定（这比仅用一个参比物质的相对保留值定性更为精确）；故保留指数也被称 Kov'ats 指数。他将正构烷烃的保留指数规定为等于该烷烃分子中碳原子数的 100 倍，如正己烷的保留指数等于 600，正庚烷等于 700，正十五烷等于 1500；且正构烷烃的保留指数与所用的色谱柱、柱温及其他操作条件无关。组分的保留指数依定义为：

$$I=100\left[Z+\frac{\lg X_i-\lg X_Z}{\lg X_{(Z+1)}-\lg X_Z}\right] \tag{8-10}$$

式中，X 为调整的保留值，可选用时间、体积或相当的记录纸距离，如 t_R'、V_R'、V_g、K 等；Z 与 $Z+1$ 分别表示正构烷烃所含碳原子数目，以及 $X_Z<X_i<X_{(Z+1)}$ 和 $Z\geqslant 5$。由于现在气相色谱仪和色谱柱的品质量很优秀，可获得准确性和重复性很好的保留指数。特别是有了化学交联的石英空心柱，用非极性的空心柱测定的非极性化合物之保留指数可重复在 1 个保留指数单位（i.u.）以内，极性的空心柱测定极性化合物在 2 个保留指数单位[5]。因此只要色谱柱（固定相）和柱温相同，就可以用文献发表的保留指数判定色谱峰，而不必用纯样。当然，须在文献给定的实验条件下，用一些已知组分进行验证，以确定该文献值的可信程度。

上述保留指数只用于恒温分析。由于在分析宽沸程复杂混合物时柱温采用程序升温，虽然两者定性方法基本一致，但保留指数的测定却不同，故许多色谱工作者为之进行了大量的工作[6~28]。将恒温的保留值换算到程序升温的保留值是很吸引人的，最初 Giddings[6]、Guiochon[7] 及 Habgood 等[8]作过尝试，这些近似计算未考虑到初始炉温、程序升温速度及柱尺寸的影响。Golovnya 等[9]及 Erdey 等[10]虽考虑了这些影响，但其表述的程序升温保留指数是实验条件的复杂函数。后来有许多恒温保留指数关联程序升温保留指数的报道[11~27]，其中 Curvers 等[12,13] 通过考虑组分在两相中分配系数与摩尔自由焓和熵之间的热力学关系，实现了恒温的保留指数向程序升温的保留指数的转换；而关亚风等[27] 通过引入正构烷烃保留值所作的校正，避免了用相比参数的方法，解决了由于相比变化引起的组分焓和熵变化的问题，使 Curvers 等的方法可将保留指数在不同柱尺寸（柱长、柱内径）、相比、初始温度及程序升温速率间进行转换。下面对此方法作详细介绍。

众所周知，谱带在柱内的运动速度 $\frac{dX}{dt}$ 为

$$\frac{dX}{dt}=\frac{u_X}{1+\frac{K_T}{\beta}} \tag{8-11}$$

式中，u_X 是组分在柱内 X 处载气的线速，K_T 是组分在温度 T 时的分配系数，K_T/β 则是容量因子 k。

分配系数 K 可表示为

$$K_T=\exp\left(-\frac{\Delta G}{RT}\right)=a\exp\left(\frac{\Delta H}{RT}\right) \tag{8-12}$$

式中，ΔG 是摩尔溶解自由能，R 是理想气体常数，ΔH 是摩尔溶解焓。

在恒温操作时载气平均线速 $\bar{u}=L/t_M$，将式（8-11）与（8-12）联立求解得到：

$$t_{R_i}=t_M\left[1+\frac{a}{\beta}\cdot\exp\left(\frac{\Delta H}{RT}\right)\right] \tag{8-13}$$

重排之后即得：

$$\ln k=\ln\frac{a}{\beta}+\frac{\Delta H}{RT} \tag{8-14}$$

此式表征色谱保留值的温度变化规律。将 $\ln k$ 与 $1/T$ 作图，就可求出 a/β 与 $\Delta H/R$。

当线性程序升温时，炉温按下式增加，

$$T=T_i+R_h\cdot t \tag{8-15}$$

式中 T_i 是初温，R_h 是程序升温速率。将此式微分并代入式（8-12），得到

$$\frac{dT}{1+\frac{a}{\beta}\exp\left(\frac{\Delta H}{RT}\right)}=R_h\cdot\frac{dX}{u_X} \tag{8-16}$$

在 T_i 和保留温度 T_R 间积分等式左边，沿柱长积分等式右边，则得到表征线性程序升温保留规律的表达式：

$$\int_{T_i}^{T_R}\frac{dT}{1+\frac{a}{\beta}\cdot\exp\left(\frac{\Delta H}{RT}\right)}=\int_0^L R_h\cdot\frac{dX}{u_X} \tag{8-17}$$

而$\frac{dX}{u_X}$沿柱长积分表示死时间（t_M），它与柱温有关；将其移至左边，就获得目前最常用的计算线性程序升温的保留温度的关系式：

$$\int_{T}^{T_R}\frac{dT}{t_{M1}\left[1+\frac{a}{\beta}\cdot\exp\left(\frac{\Delta H}{RT}\right)\right]}=R_h \tag{8-18}$$

由于载气平均线速 $\bar{u}$ 为[28]

$$\bar{u}=\frac{3}{4}\cdot\frac{p_o(P^2-1)^2}{\eta L(P^3-1)}\cdot\frac{d_C^2}{32} \tag{8-19}$$

式中，p_o 为柱出口压力，P 为柱进口与出口压力比（p_i/p_o），d_C 为柱内径，η 为载气动力学粘度，因而

$$t_{MT}=\frac{4}{3}\cdot\frac{L^2(P^3-1)}{p_o(P^2-1)}\cdot\frac{32}{d_C^2}\cdot\eta_T \tag{8-20}$$

在气相色谱常用的温度范围内，η_T 与 T 的关系通常是线性的，故 t_{MT} 有经验公式：

$$t_{MT}=a_3+b_3T \tag{8-21}$$

不难理解，当 T_i、R_i、t_{MT}、熵项（a/β）、焓项（$\Delta H/R$）已知时，使用 Simpson 规则就可以从式（8-18）求得保留温度，进而计算出由 van der Dool 等[29]定义的组分线性程序升温保留指数（I^T）值：

$$I^T=100\left[Z+\frac{T_R-T_Z}{T_{(Z+1)}-T_Z}\right] \tag{8-22}$$

式中T_R、T_Z、$T_{(Z+1)}$分别是组分及碳数为Z、$Z+1$正构烷烃的保留温度，而且$T_Z<T_R<T_{(Z+1)}$。表8-1给出了几个不同线性程序升温速率下保留温度、保留指数实验值和计算值的比较[1]，其结果令人满意。

表8-1 保留温度、保留指数实验值与计算值的比较①

程序升温速率/℃·min⁻¹	2			4			8		
组分 \ 保留温度/K	实验值	计算值	差	实验值	计算值	差	实验值	计算值	差
正辛烷	345.13	345.12	−0.11	360.26	360.37	−0.12	364.08	383.82	+0.28
正十二烷	401.24	400.78	+0.46	423.42	422.95	+0.46	453.39	452.11	+1.28
庚醇	363.90	364.22	−0.33	382.99	383.02	−0.04	410.13	409.06	−1.06
癸醇	409.36	409.04	+0.32	431.88	431.39	+0.49	462.32	460.69	+1.63
3-戊酮	336.24	336.34	−0.11	347.49	347.62	−0.13	367.48	367.38	−0.10
3-辛酮	359.74	360.08	0.34	378.48	378.61	−0.13	405.46	404.68	+0.78
2,4,4-三甲基-1-戊烯	338.18	338.29	−0.12	350.52	350.64	−0.12	371.78	371.62	+0.15
1-十三烯	414.31	414.04	+0.27	437.08	436.49	−0.59	467.72	465.91	+1.81
甲苯	341.29	341.44	0.16	355.16	355.32	0.16	378.04	377.87	+0.17
1,2-二甲基苯	353.98	354.24	−0.26	371.94	372.09	−0.16	398.53	397.98	+0.54
异丁基苯	370.10	370.34	−0.25	与正十烷重合			419.52	418.07	+1.45
组分 \ 保留指数	实验值	计算值	差	实验值	计算值	差	实验值	计算值	差
庚醇	951.56	952.07	−0.51	951.56	951.97	−0.42	—	—	—
癸醇	1255.19	1255.40	0.21	1255.32	1255.64	−0.32	—	—	—
3-戊酮	670.49	672.79	−2.30	660.58	662.59	−2.01	672.89	673.41	0.52
3-辛酮	922.24	923.06	−0.82	923.72	924.33	−0.61	925.57	925.51	+0.06
2,4,4-三甲基-1-戊烯	709.05	710.09	−1.04	710.32	710.98	−0.66	711.96	711.61	+0.35
1-十三烯	1288.85	1288.93	−0.08	1289.31	1289.31	+0.05	1289.70	1289.81	−0.11
甲苯	749.73	750.84	−1.12	753.06	753.80	−0.74	756.98	756.40	+0.38
1,2-二甲基苯	877.19	877.92	−0.73	881.20	881.62	0.41	885.87	885.60	+0.27
异丁基苯	995.33	994.95	+0.37	与正十烷重合			1004.21	1003.88	+0.33

①色谱柱为OV-1，50m×0.2mm，其$\beta=150$。

在任意多阶程序升温情况定性时，保留值的计算方法如下：

组分谱带在柱内x处的运动速度为

$$\frac{dx}{dt}=\frac{U_X}{1+K_T} \tag{8-22}$$

在等温下，经过时间Δt_i，谱带在柱内移动的柱长分数为

$$\Delta m_{iso}=\frac{\Delta x}{L}=\frac{\Delta t_i}{(1+K_T)t_{MT}} \tag{8-23}$$

在程序升温速率为R_i时，从时间t_i到$t_{(i+1)}$（或柱温T_i到$T_{(i+1)}$）经过的柱长分数为

$$\Delta m_{TP}=\frac{1}{R_i}\int_{T_i}^{T_{(i+1)}}\frac{dT}{(1+K_T)t_{MT}} \tag{8-24}$$

在任意多阶程序升温方式下，当柱长分数之和等于1时，组分流出柱子，

$$\sum\frac{\Delta t_i}{(1+K_T)t_{MT}}+\sum\frac{1}{R_i}\int_{T_i}^{T_{(i+1)}}\frac{dT}{(1+K_T)t_{MT}}=1 \tag{8-25}$$

式中K_T、t_{MT}可从式（8-14）、式（8-21）求出，根据程序升温方式解式（8-25）[30,31]，即可求得任意多阶程序升温方式的保留温度。式（8-25）也是将恒温保留指数向多阶程序升温保留指数转换的基础。

四、保留值规律定性

如果欲分析的未知物既无纯物质又无保留值数据时，常可利用色谱保留值规律来定性。

（一）同系物的定性

对于同系物来说，其通式为$CH_3 \leftarrow CH_2 \rightarrow_n X$，成员间分子骨架主要是 $—CH_2—$ 基团的差异，因此可利用碳数规律及基团增量[32]进行定性。

1. 用碳数规律常数 A_1 直接进行定性

在一定的温度下，同系物化合物的调整保留时间（或V'_R、V_g、k 值等）与其碳数存在线性关系。

$$\ln t'_R = A_1 \cdot n + b_1 \tag{8-26}$$

其斜率就是碳数规律常数 A_1。

$$\ln \frac{t_{R(n+1)}}{t_{Rn}} = A_1 \tag{8-27}$$

这种联系对烷、烯、醛、酮、醇、乙酯、乙酸酯、酯、硝基化合物、脂肪胺、吡啶同系物、芳烃、二烷基醚、硫醇、烷基硝酸酯、取代四氢呋喃及呋喃等许多化合物均能成立[33]。一个典型的线性图如图 8-1 所示。故知道给定柱子的 A_1 值，对服从碳数规律的同系物成员之定性，是十分有用的。

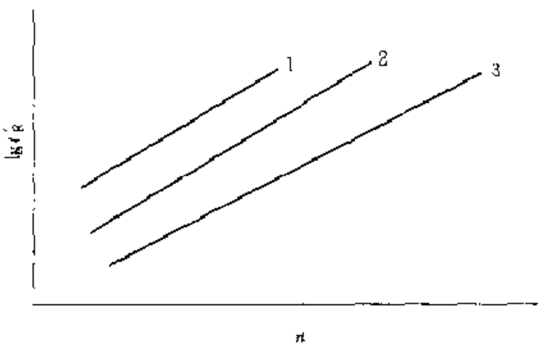


图 8-1 同系物调整保留时间的对数值与碳数的关系

1—n-乙酸酯；2—n-醇；3—n-烷

根据色谱保留值方程[32]，同系物成员间在偶极矩、氢键作用力或与固定相的作用距离有所差异时，碳数规律会发生明显偏差。一般来说，保留指数与碳数的线性关系可从高碳数外推到C_5；外推到C_4时误差不大于 5i. u.，外推到C_3时误差不大于 10 i. u.[34]。分子中增加CH_2使保留指数偏离 100±3 的变化主要由下述三方面因素引起[35]：

①固定相有很强的分子间相互作用，如腈基固定相；或被分析物在 1-位有一极性基团；

②在增加CH_2的键上只有三个或更少的碳；

③基团远离末端，如酯基或双键等。

就①和③的情况而言，保留指数在特定同系物中仍线性增加，但每个碳数对 100 i. u. 的保留指数可能偏离 10 i. u.，就腈基固定相来说，甚至低达 70 i. u.。

除上述数种情况外，式（8-26）是成立的，且 A_1 的变化趋势为

①在相同的固定液上，不同的同系物 A_1 值相差不大（表 8-2）。对通常的直链化合物，A_1 值的差异不大于 2%，但当官能团和固定相有强相互作用时，其偏离高达 7%[36]，而且当分子内有支链时，由于作用距离的增加，会使 A_1 值有所下降。

②对于不同的固定液在相同柱温时，随着固定液极性的增加，A_1 值下降（表 8-3）。对许

多甲基硅氧烷固定液，A_1值差不多，基本上可通用。

表 8-2 某些同系物的 $A_{1(hom)}/A_{1(alk)}$ 值①

固定相	OV-1			SE-54			Carbowax 20M			Carbowax 20M（化学交联）		
同系物	t_C/°C	$\frac{A_{1(hom)}}{A_{1(alk)}}$	N②	t_C/°C	$\frac{A_{1(hom)}}{A_{1(alk)}}$	N	t_C/°C	$\frac{A_{1(hom)}}{A_{1(alk)}}$	N	t_C/°C	$\frac{A_{1(hom)}}{A_{1(alk)}}$	N
n 醇	60	1.028±0.006	4	60	1.031±0.025	3	60	1.030±0.009	3	140	1.024±0.003	3
	140	1.013±0.003	6	140	1.010±0.011	7	140	1.028±0.039	4	180	1.023±0.010	3
							180	1.026±0.012	3			
1 烯	60	1.000±0.001	4	60	1.000±0.000	4	60	0.993	2	60	0.990	2
	140	1.000±0.001	5	140	1.000±0.001	5	100	0.995±0.006	3	100	0.992±0.020	3
	220	1.001	2	220	0.997	2	140	1.001±0.006	3	140	0.999±0.006	3
二 n 烷基醚	60	0.974	2	60	0.977	2	100	0.970	2	100	0.964	2
	140	0.979	2	140	0.981	2	180	0.979	2	180	0.989	2
	220	0.987	2	220	0.983	2						
	260	0.985	2	260	0.986	2						
羧酸	60	1.032±0.046	3	60	0.964	2	140	1.030±0.047	4	140	1.027±0.048	4
	140	1.041±0.025	3	140	1.034±0.018	3	180	1.074±0.025	4	180	1.067±0.011	4
2 酮	60	1.008±0.004	4	60	1.011±0.005	4	60	0.991±0.001	3	60	0.986±0.001	3
	140	1.007±0.002	5	140	1.006±0.002	3	100	0.993±0.003	5	100	0.999±0.047	4
										140	1.018±0.068	2
3 酮	60	0.970±0.033	4	60	1.008±0.001	3	60	0.984±0.007	3	60	1.079±0.006	3
	140	1.005	2	140	1.005	2	100	0.988	2	100	1.039	2
甲基烷	60	0.987	2	60	0.986	2						
烷基乙酸酯	60	1.001±0.001	4	60	1.001±0.014	4	60	0.984±0.022	3	60	0.979±0.015	3
	140	1.003±0.001	6	140	1.004±0.004	5	100	0.998±0.025	4	100	0.998±0.004	4
							140	1.020±0.035	3	140	1.002±0.002	3
甲基酯	60	0.978±0.079	3	60	0.988±0.007	3	60	0.988	2	60	0.983	2
	140	1.005±0.006	4	140	1.006±0.002	6	100	0.999±0.012	4	100	0.998±0.003	3
							180	1.005±0.018	3	140	1.002±0.002	3
										180	1.002±0.016	3
溴代烷	60	1.012±0.002	3	60	1.014±0.002	3	60	0.984±0.004	3	60	0.976±0.005	3
	140	1.010±0.001	7	140	1.010±0.001	7	100	1.001±0.003	5	100	0.998±0.003	5
	220	1.009±0.002	3	220	1.010±0.002	3	140	1.012±0.001	4	140	1.001	2
	260	1.007	2				180	1.015±0.003	3	180	1.008±0.006	3
1 碘烷				60	1.004	2	60	0.961±0.001	3	60	0.953±0.002	3
	140	1.010±0.001	5	140	1.010±0.000	5	100	0.990±0.004	5			
							140	1.010	2	140	1.013	2
烷基腈	60	1.020±0.000	3	60	1.021	2						
	140	1.009±0.002	5	140	1.010±0.001	5	100	0.999±0.002	4	100	0.994±0.001	3
	220	1.008±0.001	3	220	1.011	2	140	1.012±0.001	3	140	1.054±0.043	3
				260	1.028	2	180	1.025±0.002	4	180	1.038±0.061	4

①alk 代表正构烷烃同系物，hom 代表其他相应的同系物。

②N 为同系物数目。

由于有下式：

$$\ln \frac{t'_{R_1}}{t'_{R_2}} = \frac{A_1}{100} (I_1 - I_2) \tag{8-28}$$

因此，

$$I_1 = I_2 + 100 \frac{\ln \frac{t'_{R_1}}{t'_{R_2}}}{A_1} = I_2 + 100 \frac{\ln r}{A_1} \tag{8-29}$$

故除了可用 A_1 对同系物成员定性外，还能将 A_1 用于仅知道一个峰的保留指数的谱图中获得其他未知物的保留指数。利用一些气相色谱手册中的保留指数和式（8-29），肯定能得到很多有用的定性信息。

不仅如此，利用 A_1 值可排除色谱图中有某类化合物，例如未知物的保留时间落在 C_7 和 C_8 直链烷烃之间，则此未知物不可能是直链烷烃，因为分子中不存在分数的碳。

A_1 值与柱温的关系为

$$A_1=\frac{a_2}{T_C}+b_2 \tag{8-30}$$

式中，a_2 与 b_2 都是常数，且 b_2 为负值。文献［32］中列出 80 多种固定相上 a_2 与 b_2 的数值，可供在定性中使用。

2. 用基团增量值进行定性

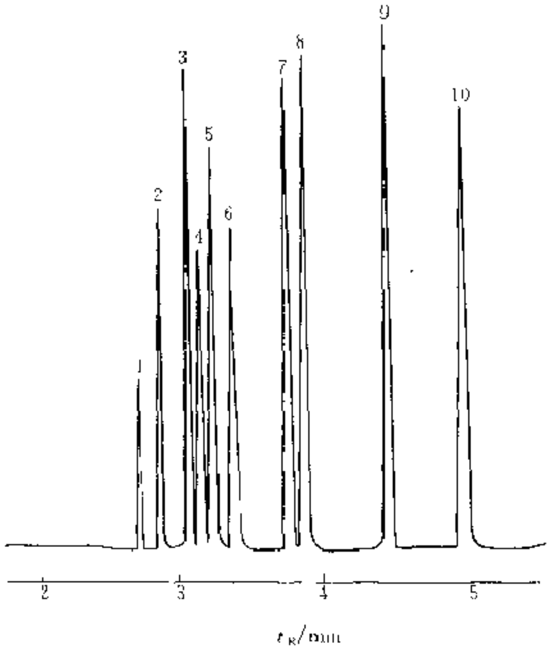


图 8-2 McReynolds 试验混合物色谱图[38]

色谱柱：OV-1，15m×0.25mm，d_f=0.23μm

柱温：90℃

载气：N_2

色谱峰	1	2	4	6	7	9	10
组分名	n-C_5	n-C_6	1，4-二噁烷	吡啶	n-C_8	2-辛炔	n-C_9
I_{exp}	500	600	697	742	800	865	900

分子中特定位置的基团对于特定的固定相有一几乎恒定的基团增量值[32,37]，这一特性也可用于同系物混合物的定性，例如用 OV-1 空心柱获得图 8-2 所示 McReynolds 试验混合物的色谱图[38]，若已知第 1，2，7，10 号色谱峰分别为 n-C_5、n-C_6、n-C_8、n-C_9 烷，第 4、6、9 号色谱峰分别为 1，4-二噁烷、吡啶、2-辛炔，要求判定第 3、5、8 号色谱峰哪个是 2-戊酮、硝基丙烷或碘丁烷。由于不知此色谱柱上 $-\mathrm{C(=O)CH_3}$、$-NO_2$ 及 $-I$ 的基团增量值，现借用

Sadtler 手册[13] 中化学交联 OV-1 空心柱的基团增量值[32]，定性时算出的 I_{cal}值列于表 8-4。依前面所述的碳数规律，可求出正庚烷的保留时间为 3.2min．几乎与第 4 号色谱峰重合（略大于第 4 号峰）。由此可知，第 3、5、8 号色谱峰分别是 2-戊酮、硝基甲烷、碘丁烷，判定的结果与实际定性结果相符合。

表 8-3　不同柱温下固定液碳数规律常数的相对值（角鲨烷为参比固定液）①

固定液 \ A_l/A_l° \ 柱温 ℃	45	60	75	90	105	120
角鲨烷	1	1	1	1	1	1
Apiezon-L	0.956	0.96	0.964	0.968	0.973	0.978
SE-30	0.854	0.85	0.846	0.841	0.835	0.831
OV 1	0.853	0.85	0.846	0.843	0.838	0.834
SP-2100	0.869	0.863	0.858	0.852	0.846	0.839
OV-101	0.87	0.862	0.855	0.847	0.838	0.828
OV-3	0.886	0.879	0.873	0.865	0.858	0.849
OV 7	0.893	0.886	0.879	0.871	0.862	0.853
OV 11	0.891	0.886	0.881	0.875	0.869	0.863
OV 17	0.884	0.876	0.867	0.857	0.847	0.835
OV-22	0.866	0.854	0.842	0.828	0.814	0.798
OV-25	0.876	0.855	0.833	0.809	0.783	0.755
QF 1	0.717	0.716	0.716	0.715	0.714	0.713
PEG-20M	0.745	0.755	0.765	0.777	0.789	0.802

① A_l 和 A_l° 分别是固定液和角鲨烷的碳数规律常数。

（二）异构物的定性

1．利用出峰次序

色谱分析实践表明，有些物质在某些固定相上常依一定的次序流出。在定性分析时，可考虑借助这些事实。

表 8-4　根据基团增量(GI)定性结果

基　团	$-\mathrm{C(=O)CH_3}$	$-\mathrm{NO_2}$	$-\mathrm{I}$
GI	174	406	430
组分	2-戊酮	硝基丙烷	碘丁烷
I_{cal}	674	706	830
定性结果（峰号）	No.3	No.5	No.8

在一般固定相上，同系物成员按分子量大小顺序流出；在强极性固定相上，组分常按极性从小到大的顺序流出；在中等极性固定相上，组分常按沸点顺序流出，而沸点相同的极性和非极性组分，则一般是非极性组分先流出；在非极性固定相上，同沸点物质中常是烃类组分先流出；在氢键型（如多元醇类）固定相上分离可形成氢键的组分时，基本上按形成氢键能力从小到大的顺序流出；在高分子多孔微球固定相上，基本按分子量从小到大的顺序流出，且水一般在有机物之前流出；在分子筛和碳分子筛等固体吸附剂上，O_2 与 N_2 一般在有机物之前流出，和 O_2 在 N_2 前流出，等等。下面讨论各类异构体的流出规律。

（1）位置异构体　对于键状化合物的位置异构体，当取代基从键末端向中央位移时，通常保留值越来越小，即流出变早。出现例外的情况是，由于构象关系，甲基取代基 2 位与 3 位的出峰次序反转，例子可见图 8-3 与图 8-4。对于环上的位置异构体，情形就较复杂，但也有可利用的信息。比如用有机皂土分离芳烃及其取代物的异构体时，芳环上的两个基团相同者，通常是按对位、间位、邻位的顺序流出。

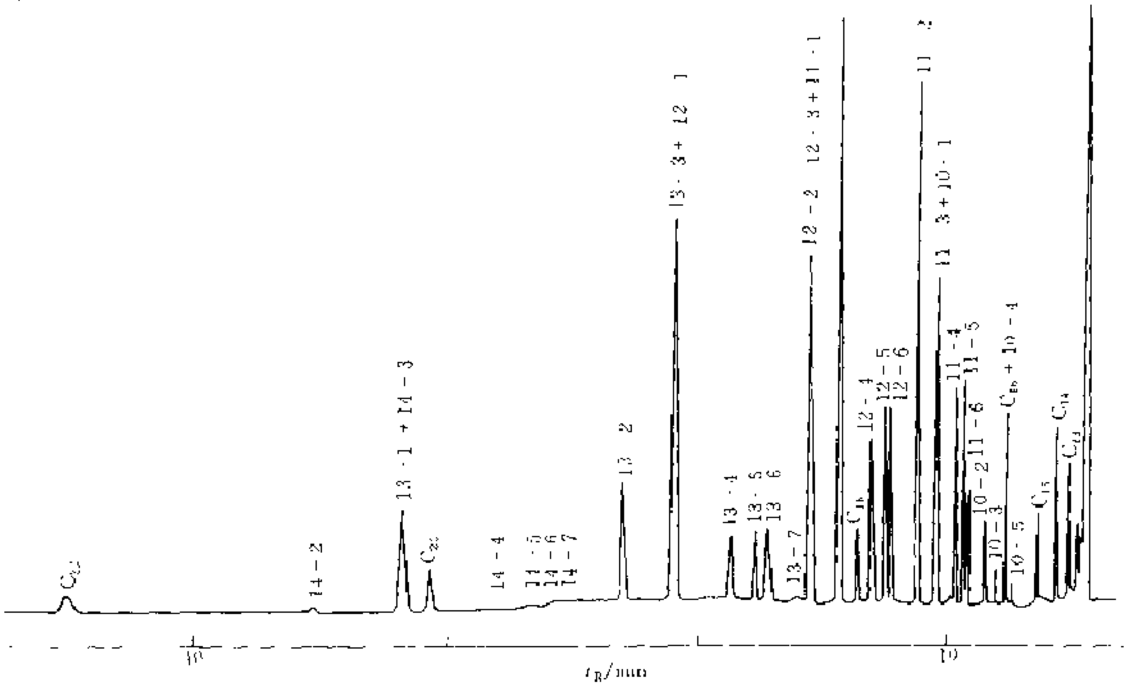
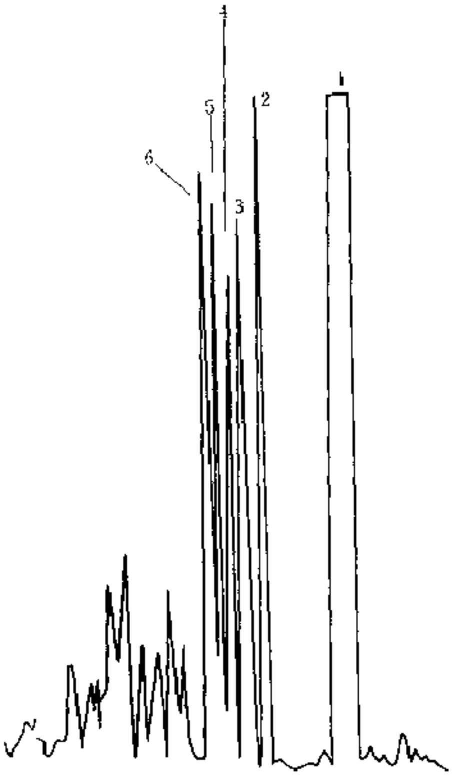


图 8-3 C_{13}～C_{18}正构烷烃与C_{10}～C_{13}正构烯烃羟化产物(醇)的乙酸酯混合物色谱图[36]

色谱峰：C_{13}—正十三烷；C_{14}—正十四烷；C_{15}—正十五烷；C_{16}—正十六烷；10-5—5-癸烯；10-4—4-癸烯；10-3—3-癸烯；10-2—2-癸烯；11-6—6-十一烯；11-5—5-十一烯；10-1—1-十一烯；11-4—4-十一烯；C_{18}—正十八烷；11-3—3-十一烯；11-2—2-十一烯；12-6—6-十二烯；12-5—5-十二烯；11-1—1-十一烯；12-4—4-十二烯；12-3—3-十二烯；12-2—2-十二烯；13-6+13-7—6-十三烯+7-十三烯；13-5—5-十三烯；12-1—1-十二烯；13-4—4-十三烯；13-3—3-十三烯；13-2—2-十三烯；13-1—1-十三烯

色谱柱：Carbowax 20M，87m×0.25mm　　载气：H_2，0.5ml·min^{-1}

柱温：130℃



色谱峰：1—正十四烷；2—3-甲基十三烷；3—2-甲基十三烷；4—4-甲基十三烷；5—5-甲基十三烷；6—6-甲基十三烷+7-甲基十三烷

色谱柱：甲基硅氧烷，5m×0.2mm，d_f=0.5μm

柱温：40℃→300℃，5℃·min^{-1}

载气：H_2，1ml·min^{-1}

检测器：FID

图 8-4 α-十四烯催化裂解产品的色谱图[40]

(2) 顺、反式异构体　对于双键引起的顺、反式异构体，顺式的偶极矩大于反式（如果后者有的话），又由于两取代基（或碳链）处于双键的不同位置，因此基团与固定相的接触情况不同，故出峰次序受链长和链中其他共存基团的影响。比如在角鲨烷或Carbowax 20M 上，n-C_{16}^{2} —C_{18}^{2}烯双键在 2～4 位的，反式先流出，而 5 位及以后的，顺式却先流出。在极性和非极性固定液的色谱柱上，不饱和酯顺、反式异构体出峰规律不同，如表 8-5 所示[41]。至于环状化合物顺、反式异构体，通常是反式先流出，例子可见文献［32］及表 8-6[42]。

表 8-5　顺式(*cis*)和反式(*trans*)单乙烯脂肪酸甲酯异构体的等当碳长度(ECL)[41]

Δ^{n}①	SP-2340		Supelcowax-10		SPB-1	
	cis	trans	cis	trans	cis	trans
5	20.47	20.38	20.15	20.25	19.63	19.77
8	20.57	20.40	20.15	20.20	19.60	19.69
11	20.62	20.41	20.21	20.22	19.62	19.70
14	20.78	20.55	20.36	20.33	19.75	19.79
17	20.99	20.65	20.39	20.44	19.95	19.90

①双键相对于羧基的位置。

表 8-6　环烷烃顺、反式异构体在不同固定液上保留指数的差值($I_{cis}-I_{trans}$)[42]

固定液 化合物	角鲨烷	SE-30	OV-225	PEG-20M
1，4-二甲基环己烷	20.0	24.5	35.2	37.0
3，6-二甲基环己烯	5.7	11.5	12.9	13.3
1-异丙基-4-甲基环己烷	10.8	10.5	2.2	9.8
3-异丙基-6-甲基环己烯	1.9	6.9	8.9	7.5
1-异丙烯基-4-甲基环己烷	15.1	19.3	27.1	47.2

(3) 手性异构体

①在二酰胺固定相上：α-氨基酸与γ-氨基酸或 2-氨基-1-醇的对映体出峰次序恰好相反。Feibush 等[43]用“C_5～C_7”模型进行了解释，认为 L-α-氨基酸溶质与 L-构型溶剂形成“平行结构”，L-γ-氨基酸或 L-2-氨基-1-醇溶质与 L-构型溶剂形成“反平行结构”。D-构型溶质与 L-构型溶剂的作用正好相反，形成的“平行结构”比较稳定，故在 L-构型溶剂上，α-氨基酸的出峰次序是 L-构型在 D-构型之后，γ-氨基酸和 2-氨基-1-醇的出峰次序是 L-构型在 D-构型之前。β-氨基酸由于没有“C_5”、“C_7”，只有“C_6”，不能与溶剂形成“C_5～C_7”作用，它的出峰次序在不同的固定相上各有所不同。

②在酰脲类固定相上：对映体的流出次序和“α值”主要取决于溶质手性碳周围的取代基排列，而不是其构型[44]。从联在不对称碳原子上的氮原子一侧观察其他取代基由大到小的排列方式，在 L，L′-构型固定相上，顺时针方向排列的溶质后出峰，取代基的体积差别愈大，“α值”也愈大。比如在 L，L′-构型固定相上，由于 R 和 COR′大小顺序的变化，N-TFA-丙氨酸酯的出峰次序是 D-构型先于 L-构型，而 N-TFA-亮氨酸酯为 L-构型先于 D-构型。

③在单酰胺类固定相上：由于 R-构型溶质与 R-构型溶剂形成比较稳定的“平行结构”，故 N-TFA-胺的出峰次序是 R-构型后于 S-构型。但是对于手性酸的酰胺衍生物，其结构与手性胺的 N-TFA-衍生物虽然相似，出峰次序却正好相反，R-构型先于 S-构型出峰。这是由于手性胺中与不对称碳相联的是“N—H”，而手性酸是“C＝O”[45]。

2. 利用沸点规律、双柱规律

理论与实践都证明[3],同族具有相同碳原子数目的碳链异构体,其保留值的对数与其沸点有线性关系:

$$\ln k = A_2 T_b + C_2 \tag{8-31}$$

式中,A_2、C_2 为常数,T_b 是组分的沸点,k 也可用 t_R'、V_R'、V_g 值代替。

图 8-5 与图 8-6 给出 16 个六碳醇异构体(见表 8-7)分别在固定液 OV-101 和 Carbowax 20M 上的沸点规律[45]。其回归结果如表 8-8 所示。应该指出,在 Carbowax 20M 上,3-甲基-3-戊醇和 2-甲基-3-戊醇明显偏离线性。图 8-7 显示其双柱规律也发生偏差,这在定性时应引起注意。

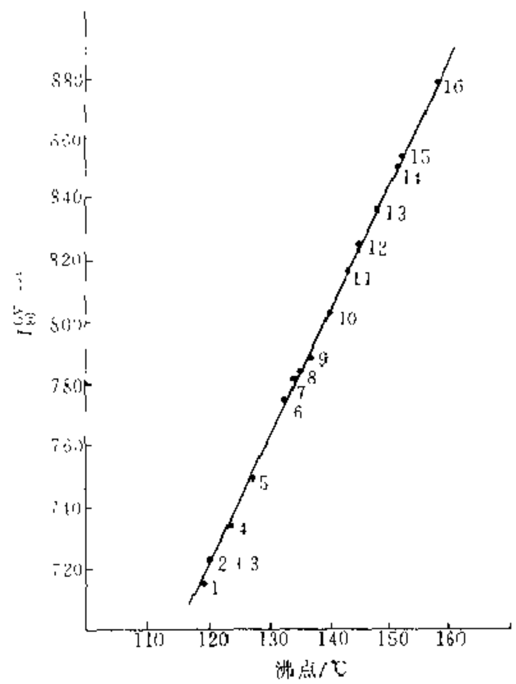


图 8-5 C_6 醇异构体在 OV-101 柱 80 ℃时的保留指数与沸点的关系

(组分名称见表 8-7)

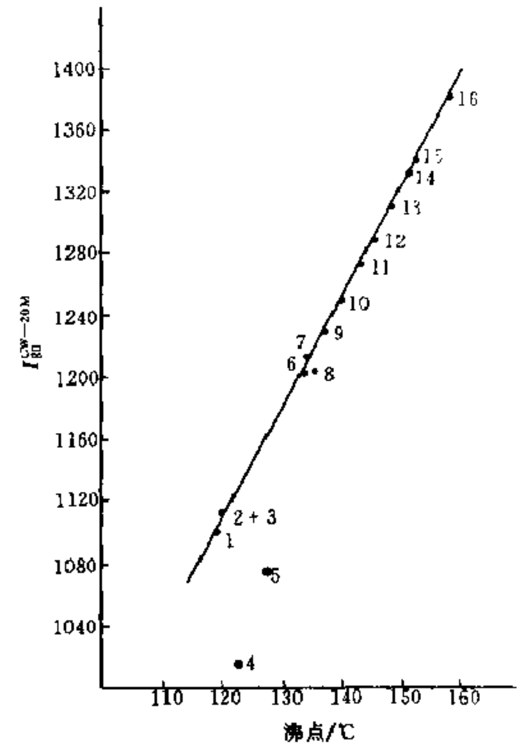


图 8-6 C_6 醇异构体在 Carbowax 20M 柱 80 ℃时的保留指数与沸点的关系

(组分名称见表 8-7)

表 8-7 六碳醇及其沸点

编号①	组 分 名	沸点/℃	编号①	组 分 名	沸点/℃
1	2,3-二甲基-2-丁醇	118.7	9	2,2-二甲基-1-丁醇	136.7
2	3,3-二甲基-2-丁醇	120.4	10	2-己醇	140.0
3	2-甲基-2-戊醇	120.5	11	3,3-二甲基-1-丁醇	143.0
4	3-甲基-3-戊醇	123.0	12	2,3-二甲基-1-丁醇	145.0
5	2-甲基-3-戊醇	126.7	13	2-甲基-1-戊醇	148.0
6	4-甲基-2-戊醇	133.0	14	4-甲基-1-戊醇	151.6
7	3-甲基-2-戊醇	134.3	15	3-甲基-1-戊醇	152.4
8	3-己醇	135.0	16	1-己醇	158.0

① 图 8-5、8-6 及 8-7 中组分的编号。

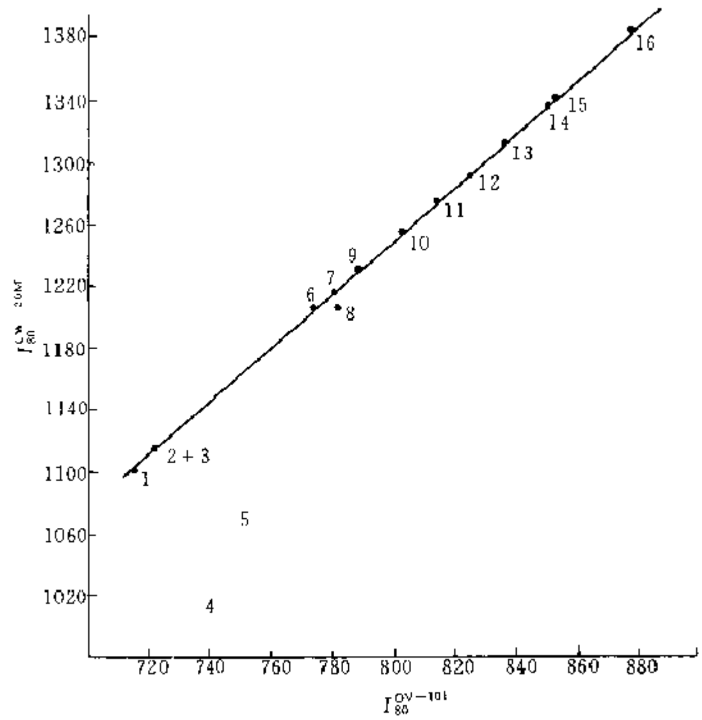


图 8-7 六碳醇的双柱规律

（保留指数值分别为OV-101柱与Carbowax 20M柱上于80℃的数值，组分名称见表8-7）

表 8-8 六碳醇异构体沸点规律的回归结果

色谱柱	柱温/℃	回归方程①	回归系数	标准偏差
OV-101	80	$I=4.13t_b+224.58$	0.999	±0.24
Carbowax 20M	80	$I=7.24t_b+239.78$	0.999	±0.26

① t_b—沸点温度值。

可以指出，只要组分间存在碳数规律或沸点规律，则一定存在双柱规律。

总之，利用色谱保留值数据可为色谱定性分析提供很多有用信息，在应用时有两点值得特别注意：其一是未知组分的保留值虽然等于某物质的保留值，却只能说此未知组分可能是此物质，但不能肯定必定是此物质；其二是未知组分的保留值不等于某物质的保留值时，可以完全肯定未知组分必定不是该物质。在应用色谱保留值定性的同时，若能与下述一些方法相配合，则更好。

第二节 检测器定性法

一、联用仪器定性法

由于气相色谱仪对未知化合物的定性和结构识别能力有限，而质谱仪和其他波谱仪如红外分光仪、核磁共振仪等对化合物的结构阐明特别有效，故人们将气相色谱仪与这些仪器联用，组成GC-MS、GC-FITR、GC-NMR、GC-TEA、GC-AES等联用仪器。其中应用最多的是GC-MS与GC-FITR，在第三章对其已作介绍，用质谱仪（MS）和傅里叶变换红外光谱仪（FITR）代替了常用的气相色谱检测器，并很好地对色谱峰进行定性。此处不再赘述。

二、选择性检测器定性

选择性检测器只对某类或某几类化合物有信号，因此可用来判定被检测物质是否为这些类化合物。例如氢火焰离子化检测器对一些无机气体不产生信号，对含碳的有机化合物有信号；电子捕获检测器只对电负性强的物质有信号，故可据此进行判定。如比较两个或两个以上选择性检测器分析同一样品所得的色谱图，还可得到更多的定性信息（这两个选择性检测器可以串联或并联使用）。图 8-8 是用组合检测器分析同一样品的结果[47]。

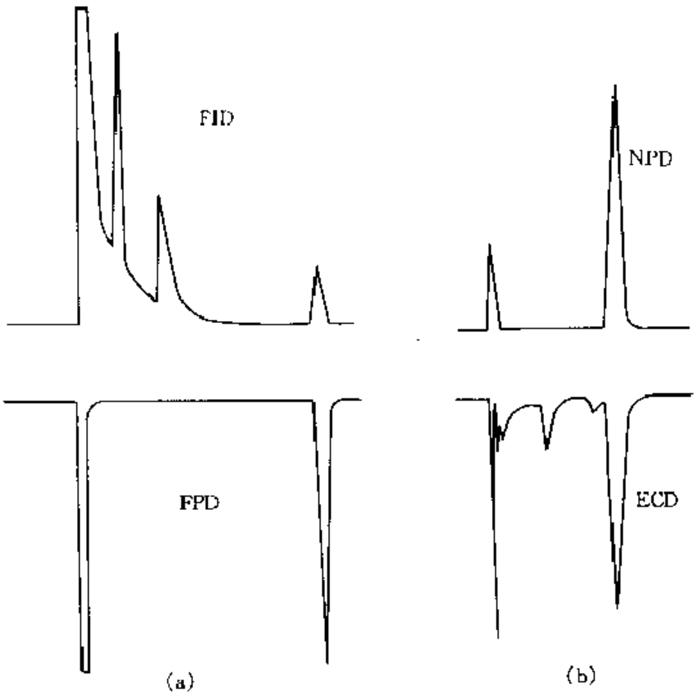


图 8-8　组合检测器的色谱图

(a) 使用 FID 与 FPD；(b) 使用 NPD 与 ECD

一个好的组合检测器定性体系需具备以下条件：

①两个检测器灵敏度的比值须随未知物类型的不同而有较大的不同，对同族所有组分的比值最好相同。

②两个检测器有较宽的线性范围，因而灵敏度的比值不随样品量大小而变化，仅与未知物的特性有关。

③两个检测器都有好的重现性并易于校正，因而测定一种已知物的比值即可计算其他物质的比值。

Oaks 等[48] 和 Dawson[49] 的研究结果表明，组分在两个或两个以上选择性检测器上所得灵敏度的比值，对许多类型化合物有特征性。表 8-9 列出了有机硫化合物与多环芳烃等的 ECD/FID 的相对质量灵敏度值。Baker[50] 在测定 70 个含氮的药物于 NPD 和 FID 的响应后，曾提出用咖啡因为参比物的响应指数：

$$响应指数=\frac{(药物于\ NPD\ 的峰高)/(药物于\ FID\ 的峰高)}{(咖啡因于\ NPD\ 的峰高)/(咖啡因于\ FID\ 的峰高)}$$

各类药物的响应指数与其化学结构的关系如图 8-9 所示。

表 8-9　一些物质的 ECD 与 FID 质量灵敏度比值[46,49]

物　质	ECD/FID 质量灵敏度比值	物　质	ECD/FID 质量灵敏度比值
		䓛	1.5
有机硫化物		3，4-苯并芘	343.3
硫化物	0.01～0.10	1，2-苯并芘	310.0
硫醇	0.10～0.50	3，4-苯并荧蒽	180.2
饱和二硫化物	0.60～1.0	苝	1.5
不饱和二硫化物	8.0～20.0	**非金属与金属有机化合物**	
三硫化物	150～400	二甲基硒	0.01
多环芳烃		二乙基硒	0.002
蒽	20.2	二丙基硒	0.001
荧蒽	32.5	二甲基二硒	130.0
芘	124.3	二乙基二硒	135.0
1，2-苯芘芴	5.5	二丙基二硒	150.0
3-甲基芘	69.2	乙基腈化硒	320.0
苯并[mno]荧蒽	250.0	四甲基铅	100
1，2-苯并蒽	267.2	四乙基铅	100

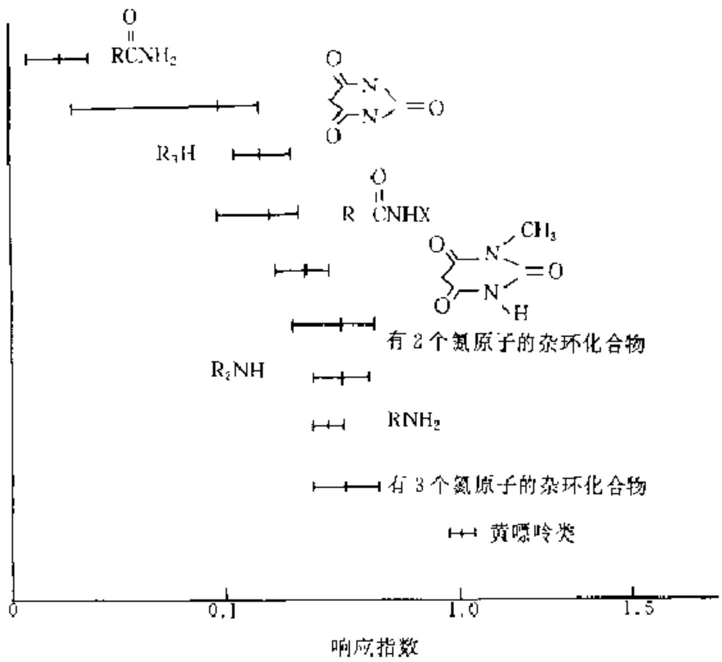


图 8-9　各类药物的响应指数与其化学结构的关系
（纵坐标为平均值与标准偏差）

第三节　化学方法定性法

一、化学试剂定性法

（一）消去法

这是用物理或化学的消除剂将样品中某类化合物消除、减少或转移，从而获悉样品中有无这类官能团化合物的方法。比如将给定的消除剂置于进样的注射器中，或涂在载体上放在消除柱中，样品与消除剂接触后，消除剂迅速与这类化合物发生不可逆吸附或化学反应，使

其色谱峰消失、变小或发生位移。比较未通过和通过消除剂的色谱图，可以判定样品中有无这类官能团存在。

使用注射器时，是将 (2～5) ml 的玻璃注射器抽入 (5～10) μl 消除剂使其内壁湿润，然后抽入组分浓度为 (10^{-5}～10^{-8}) g. ml^{-1}的蒸气，接触 (3～5) min 后，注入色谱仪进行色谱分析。Hoff 等[51]曾给出一些用于此法的消除剂（见表 8-10），可用以测定不饱和物、羰基化合物；判别醛类化合物与酮类化合物；判别醚、烯烃、芳烃和烷烃；将醇转化成乙酸酯或腈检测。图 8-10 与图 8-11 是他们所得的结果。

表 8-10　用于注射器中的一些消除剂[51]

消除剂	制备方法	用量/μl	注射器体积/ml	接触时间/min	附加处理	各类化合物消除程度①							
						醇	醛	酮	酯	醚	烯烃	芳烃	烷烃
金属钠	将新切的金属钠片贴在柱头上，在湿空气中放置 3min	一片厚约 1mm	10	3	无	甲	甲	甲	甲	戊	戊	戊	戊
硫酸	浓硫酸	5	2	3	无	甲	甲	甲	甲	甲	甲	戊	己
硫酸(7+3)	7ml 浓硫酸和 3ml 水，冷至室温	5	2	3	无	甲	丙	甲	丙	丙	戊	己	己
氢气	氢气和 PtO_2 数毫克(放在柱栓头上)		5	3	无	甲	甲	戊	己	戊	乙	乙	己
碘化氢	将 90%～95%$H_3PO_4$2ml 温热后，加数毫克 KI 并搅拌	润湿柱栓头	10	3	反应后用 $NaHCO_3$ 将混合物中和	甲	甲	甲	甲	甲	戊	戊	戊
溴水	新配制的饱和溴水	5	2	5	无	丁	丁	戊	戊	戊	乙	己	己
羟胺	4g$NH_2OH \cdot HCl$ 溶于 50ml 水中	5	2	3	无	丙	甲	甲	己	己	己	己	己
硼氢化钠	1g$NaBH_4$ 溶于 2ml 水中	5	2	3	无	丙	乙	乙	戊	己	己	己	己
高锰酸钾	饱和水溶液	5	2	3	无	丁	甲	戊	戊	戊	丙	己	己
亚硝酸钠	2.5g$NaNO_2$ 溶于 50ml 水中，与等体积新制备的冷却后的 0.5mol·$L^{-1}$$H_2SO_4$ 混合	5	2	3	无	乙	戊	戊	戊	己	己	己	己
乙酸酐	2ml 乙酸酐和 2 滴浓硫酸	5	2	3	反应后用 $NaHCO_3$ 将混合物中和	乙	丁	丙	戊	戊	己	戊	己
氢氧化钠	2.5gNaOH 溶于 50ml 水中	5	2	3	无	丙	丙	戊	乙	己	己	己	己
臭氧	含臭氧的氧气		5	3	用 w=10%的 $NaAsO_2$ 或三苯基磷化氢将臭氧化合物还原成羰基化合物	丁	戊	戊	戊	戊	乙	己	戊
盐酸	2.5ml 浓盐酸加入 50ml 水中	5	2	3	无	除去胺							
水	蒸馏水	5	2	3	无	减少水溶性化合物							
亚砷酸钠	5g$NaAsO_2$ 溶入 50ml 水中	5	2	3	无	除去过量臭气，减少过氧化物							
碳酸氢钠	2.5g$NaHCO_3$ 溶入 50ml 水中	5	2	3	无	除去酸性化合物							

①甲.全消除(消除 90%～100%)；乙.全消除，有新物质产生；丙.消除较多(消除 40%～90%)；丁.消除较多，有新物质产生；戊.稍有消除(消除 10%～40%)；己.不消除(消除 0%～10%)。

使用消除柱时，可根据情况将消除柱放在色谱柱前、检测器之间、色谱柱与检测器之间，如图 8-12 所示。由图 8-12(a)可知将消除柱放在色谱柱前需要进两次样才可得到样品通过和不通过消除柱的色谱图。而另外两种方式[图 8-12(b)和 8-12(c)]只须进一次样，但都只能用于填充色谱柱之后；图 8-12(b)所用的检测器 1 还必须是非破坏性的。此法常用的消除剂列于表 8-11。图 8-13 是一个应用实例，是 Ikeda 等[52]用高氯酸汞作消除剂，将烷烃、烯烃、环烷烃、芳

烃混合物中的烯烃、芳烃除去前后的色谱图，其消除效果十分明显。

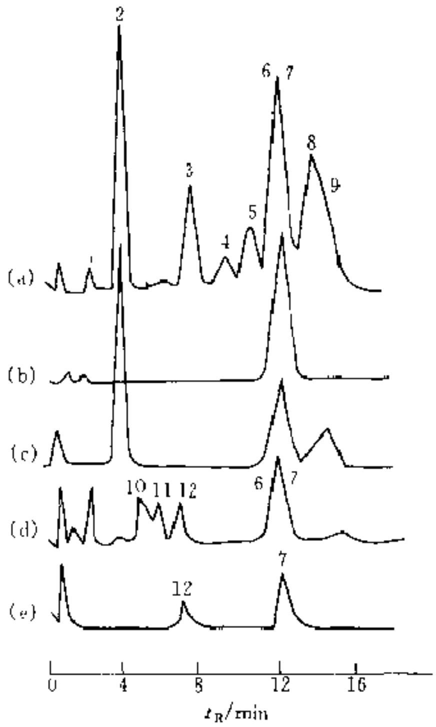


图 8-10 用注射器进行消去法操作所得的色谱流出曲线

(a) 未作消去；(b) 用浓硫酸；(c) 用金属钠；(d)，(c) 后，用臭氧（臭氧化合物分解成峰 6、10、11 与 12）；(e)，(c) 与 (d) 后，用羟胺

色谱峰：1—乙醚；2—乙基乙烯基醚；3—乙酸甲酯；4—甲醇；5—异丁烯醛；6—正丁醛；7—庚烷；8—2-丁酮；9—3-庚烯；10—丙醛；11—甲醛；12—甲酸乙酯

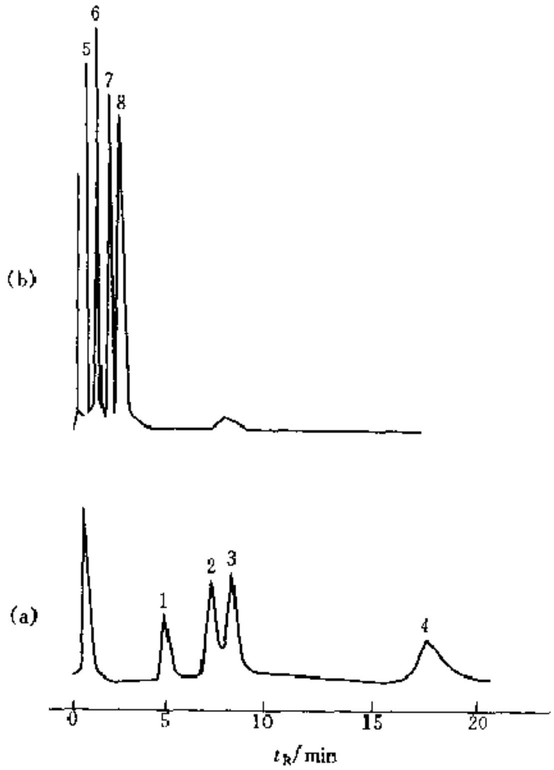


图 8-11 用注射器在进样前进行组分转换

(a) 醇样；(b) 醇样被亚硝酸转换成亚硝酸酯

色谱峰：1—甲醇；2—乙醇；3—异丙醇；4—正丙醇；5，6，7 及 8 为相应的亚硝酸酯

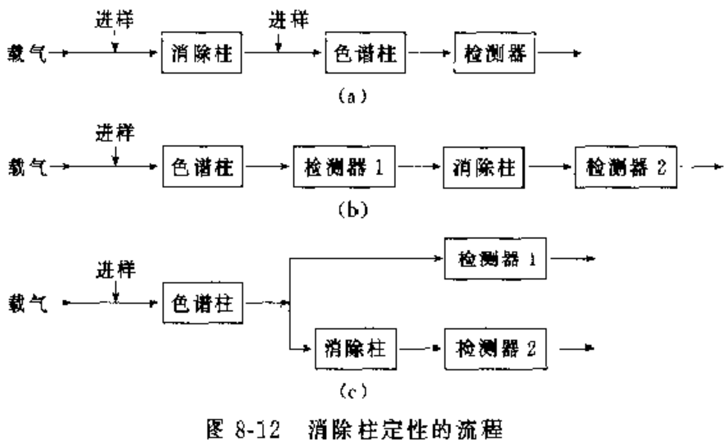
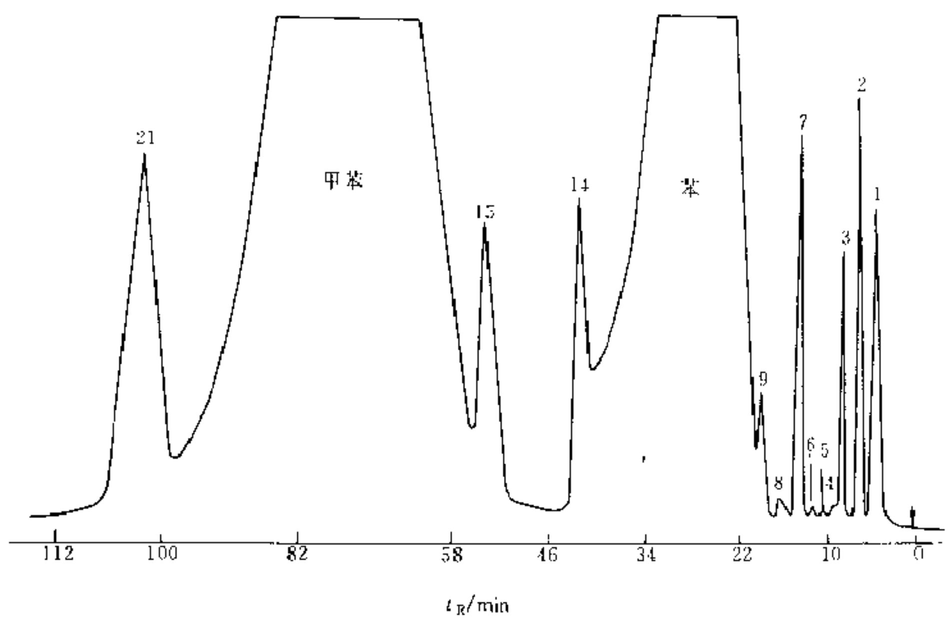
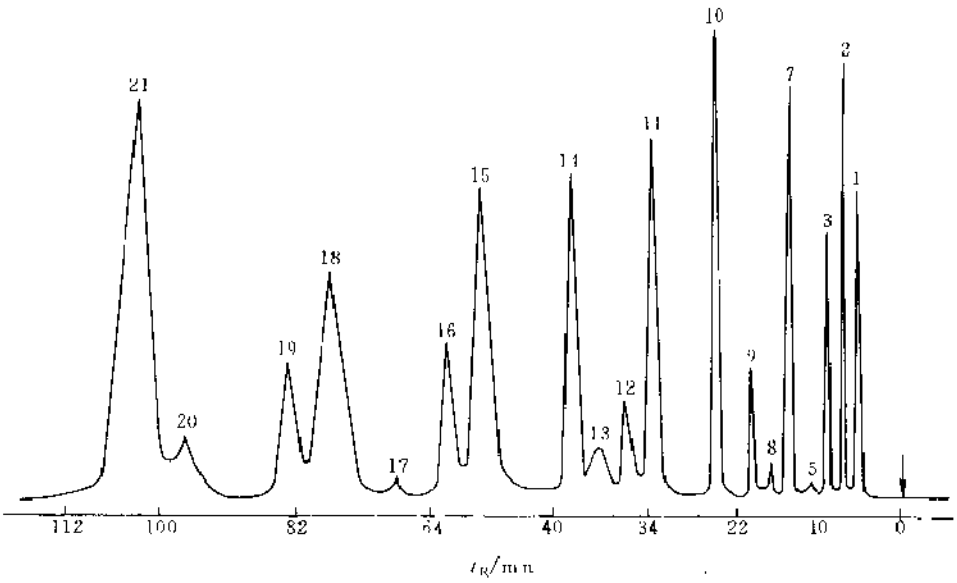


图 8-12 消除柱定性的流程

(a) 消除柱在色谱柱前；(b) 消除柱在检测器之间；(c) 消除柱在色谱柱与检测器之间



(a)



(b)

图 8-13　用消除柱进行消去法操作所得的色谱流出曲线

(a) 未作消去，25%角鲨烷柱（4m）；(b) 用高氯酸汞消去，高氯酸汞柱（0.2m）+25%角鲨烷柱（4m）

色谱峰：1—正丁烷；2—异戊烷；3—正戊烷；4—2-甲基-2-丁烯；5—2，2-二甲基丁烷；6—3-甲基-1-戊烯；7—环戊烷；8—3-甲基戊烷；9—正己烷；10—甲基环戊烷；11—环己烷；12—1，1二甲基环戊烷；13—1，反-3-二甲基环戊烷；14—正庚烷；15—甲基环己烷；16—乙基环戊烷；17—1，反2，顺3三甲基环戊烷；18—2-甲基庚烷；19—3-甲基庚烷；20—1，1二甲基环己烷；21—正辛烷

表 8-11 用于消除柱的常用消除剂

消除剂	可消除物质	从何物质	用法	消除剂	可消除物质	从何物质	用法
5A 分子筛	正构烷烃及其他直链分子	支链分子	直接装入管柱	$1mol \cdot L^{-1}$ $Hg(ClO_4)_2 + 2HClO_4 = 1+1$	烯烃、炔烃		涂于载体
5A 分子筛	醛类	酮	直接装入管柱	$20\% HgSO_4 + 20\% H_2SO_4$	烯烃、炔烃		涂于载体
5A 分子筛	酸	酯	直接装入管柱	浓硫酸	芳烃、烯烃、炔烃		涂于载体
10A 分子筛	芳烃		直接装入管柱	高氯酸汞	烯烃	烷烃	涂于载体
氧化锌	酸		直接装入管柱或涂于载体上	硼酸	醇[1]，酚[1]，水杨醛		涂于载体
马来酐	二烯烃		涂于硅胶	FFAP	醛		涂于载体
NaOH	酚类		涂于石英	亚硫酸氢钠-乙二醇	醛		涂于载体
NaBr	含羟基、羰基的有机化合物		涂于氧化铝	联苯胺	醛、酮		涂于载体
$AgNO_3$	含羟基、羰基的有机化合物及烯烃、炔烃、芳烃		涂于氧化铝	邻联(二)茴香胺	醛		涂于载体
$CuCl_2$	含羟基、羰基的有机化合物及烯烃、炔烃、芳烃		涂于氧化铝	磷酸	环氧化合物		涂于载体
乙酸汞-硝酸银 乙二醇	烯烃		涂于载体	Versamide 900	烷基、苯基卤代物		涂于载体

①生成其他物质。

进行消除法时，要注意所用消除剂的操作条件和是否有效；不用时应避免吸潮、氧化。

（二）官能团法

此方法是将色谱柱分离后的组分依次分别通入盛有特定试剂的试管中，观察这些特定试剂所发生的颜色变化、沉淀等，从而判定相应的组分具有什么官能团，供作进一步定性的依据。Walsh 等[53,54]曾对官能团分类试剂作过广泛的研究，他们所用的试剂和用途说明列在表 8-12 中。此方法不足之处是要求试剂反应速度迅速且灵敏度高，和要求样品量较多。

表 8-12 官能团的测定[53,54]

化合物类型	试剂及配制方法	阳性反应的反应颜色	检测下限 $m/\mu g$	试验的化合物	注
醇	重铬酸钾-硝酸：5 滴 5%重铬酸钾溶液加入 5ml 冷的 $7mol \cdot L^{-1}$硝酸中	黄色→蓝灰色	20	$C_1 \sim C_8$	测伯醇和仲醇较灵敏，对叔醇灵敏度低，能测所有脂肪醇
	硝酸高铈：取 90g 硝酸铈铵溶入 225ml 热的 $2mol \cdot L^{-1} HNO_3$ 中，然后加入等体积水	黄色→琥珀色	100	$C_1 \sim C_8$	
醛	2，4-二硝基苯肼：2，4 二硝基苯肼与 $2mol \cdot L^{-1}HCl$ 的饱合溶液（若样品不易溶于水，可加少量乙醇）	黄色→橙色沉淀	20	$C_1 \sim C_6$	
	Schiff 试剂：100ml0.1%品红溶液内加入 4ml 亚硫酸氢钠饱和水溶液，静置 1h 后，再加入 2ml 浓盐酸，试剂需新鲜配制	无色→粉红或深红	50	$C_1 \sim C_4$	
酮	2，4-二硝基苯肼：配制方法与测醛相同	黄色或橙色沉淀	20	$C_3 \sim C_8$ 甲基酮	

续表

化合物类型	试剂及配制方法	阳性反应的反应颜色	检测下限 m/μg	试验的化合物	注
酯	氧化肟酸铁：向10滴$1mol \cdot L^{-1}$盐酸羟胺-甲醇溶液中，加3～4滴$2mol \cdot L^{-1}$氢氧化钾的醇溶液，至溶液变蓝色为止，样品通过后，加5～6滴10%的浓盐酸，直至溶液澄清无色，加1～2滴10%三氯化铁，颜色变红	红色	40	C_1～C_5乙酸酯	
硫醇	亚硝基铁氰化钠：10滴95%乙醇加2滴5%氰化钾-1%氢氧化钠溶液，待样品通过(2～3) min后，加5滴1%亚硝基铁氰化钠溶液	红色	50	C_1～C_9	
	靛红：1%靛红硫酸溶液10滴	绿色	100	C_1～C_9	
	乙酸铅：饱和乙酸铅乙醇溶液10滴	黄色沉淀	100	C_1～C_9	对硫化氢生成黑色沉淀
	硝酸银：2%硝酸银乙醇溶液10滴	白色沉淀	100	C_1～C_9	
硫化物	亚硝基铁氰化钠：配制方法与测硫醇相同	红色	50	C_2～C_{12}	
二硫化物	亚硝基铁氰化钠：配制方法与测硫醇相同	红色	50	C_2～C_6	
	靛红：配制方法与测硫醇相同	绿色	100	C_2～C_6	
胺	Hinsberg试剂：5滴吡啶，加1滴5%新鲜配制无碳酸盐的氢氧化钠溶液，当样品通过后，加1～2滴苯磺酰氯	伯胺：黄色 仲胺：橙色 叔胺：玫瑰红或深紫红色	100	C_1～C_4	
	亚硝基铁氰化钠：10滴水加2滴无醛的丙酮，加1滴亚硝基铁氰化钠 10ml水，加2ml乙醛，加2滴10%亚硝基铁氰化钠和2滴$1mol \cdot L^{-1}$碳酸氢钠	伯胺：红色 仲胺：蓝色	50	C_1～C_4 二乙基和二戊基	
腈	氧化肟酸铁-丙二醇：向10滴$1mol \cdot L^{-1}$盐酸羟胺的丙二醇溶液加2滴$1mol \cdot L^{-1}$氢氧化钾乙二醇溶液，样品通过后加热至沸腾，冷却，溶液变清并无色，加1～2滴10%三氯化铁	酒红色	40	C_2～C_5	
芳香族化合物	甲醛-硫酸试剂：1ml浓硫酸，加1滴37%～40%甲醛	酒红色	20	苯-带C_4烷基苯	
脂肪族不饱和化合物	甲醛-硫酸试剂：1ml浓硫酸，加1滴37%～40%甲醛	酒红色	40	C_2～C_8	
烷基卤化物	硝酸银：2%硝酸银乙醇溶液，在室温下若无沉淀生成，则可加热	白色沉淀	20	C_1～C_5	
	硝酸亚汞：5%硝酸亚汞于$7.5mol \cdot L^{-1}$硝酸	碘：橙色沉淀 氯：白色沉淀 溴：白色或灰色沉淀			

二、化学反应定性法

此方法特指从样品经过反应后的组分推断母体组分的定性方法，可利用的反应很多，其中主要有以下几类。

（一）次甲基插入反应法

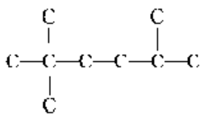
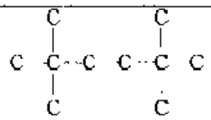
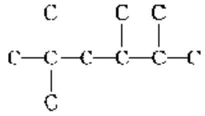
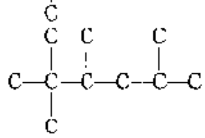
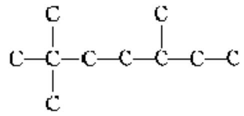
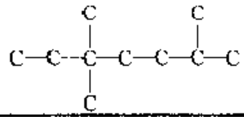
方法的原理是，重氮甲烷光解生成的次甲基可与饱合烃、环烷作用，插入到 C—H 键中生成多一个碳数的烷烃、环烷异构物，根据反应产物的沸点和数量，推断母体烃为何种物质[56]。反应式如下：

$$\equiv C-H + :CH_2 \longrightarrow [\equiv C-CH_2-CH] \longrightarrow \equiv C-CH_3$$

此插入反应对于各类型的 C—H 键均可插入，形成的异构物只与母体烃 C—H 键数目和位置有关。

例如以 2，2，5-三甲基己烷为母体的次甲基插入反应，其反应产物的结构、组成、理论值与测定值见表 8-13。

表 8-13　母体烃与次甲基反应产物

母　体	反应产物	沸点/°C	预计插入		理论值	测定值
			类型	总数	（质量分数）/%	（质量分数）/%
		136.2	叔	1	5	5.5
		145.0	仲	2	10	8.8
		149	仲	2	10	9.0
		148.0	伯	6	30	31.4
		152.8	伯	9	45	45.3

实验操作可按以下步骤进行：将一支 5ml 的试管置于冰水中冷却，加入 0.2ml 饱和的亚硝酸钠溶液和 0.2ml1mol·L^{-1}硫酸，混合均匀，然后加 50mg 甲基尿素使生成亚硝基脲备用；取另一支试管，加（1～2）ml 欲反应的母体烃及 1ml40％氢氧化钾溶液，置冰水中冷却后，倒入前一试管中混合均匀，生成上面黄色、下面白色的双层溶液，在日光下照射并在冰水中经常摇动，直至重氮甲烷的黄色消失为止。用 0.25ml 注射器取出上层油层的次甲基插入反应产物作色谱分析，必要时用数粒氢氧化钾除水。

重氮甲烷光解的次甲基与烯烃作用时，既可插入到 C—H 键生成多一个碳的烯烃，还可插入双键生成 1，2-双亚环丙基。由于后者反应速度快，生成的 1，2-双亚环丙基量多些，有时会影响 C—H 键内插产物的定性和定量，故多将烯烃加氢成饱和烃后，再按上述操作用次甲基插入法定性。

芳烃的次甲基插入反应可生成环庚三烯，但实际工作中较少用于色谱定性。

用此方法定性时，以母体烃参加反应的量较多为好，如母体烃与重氮甲烷的比例为25～50：1，可避免发生二次的次甲基反应。

（二）氢化反应法

这是用载气氢气将组分通过催化剂，进行氢化反应，然后将反应产品通过色谱柱，进行色谱分析。

如今用得最多的是碳结构分析法[56]。此方法是将含有氧、氮、硫、卤素的官能团用氢原子取代，将不饱和基团加氢，除芳烃成为六碳环烷外，其余均转化成相应的饱和烃被定性。此方法已用于脂肪族烃、芳烃、醇、醛、酮、酸、酯、酸酐、醚、环氧衍生物、胺、酰胺、甾醇类的定性，化合物的碳数可高至C_{30}。用此方法时要注意消除催化剂吸附作用造成的“记忆”效应。

催化剂的制备用浸渍法。将氯化钯溶于5%乙酸溶液（必要时加适量的碳酸钠以中和活化时产生的氯化氢，以免C_9以上碳键断裂），然后加入（60～80）目吸附性能小的色谱载体并在110 ℃烘干。催化剂的钯含量为w≈1%。使用前用氢气在125 ℃与200 ℃各活化30min，并在操作温度下保持20min。

各类化合物的碳结构分析产物如表8-14所示。从表中可知有些反应后仅产生母体烃，有些较多地产生少一个碳原子的烃，还有少数发生热解。图8-14是用碳结构分析判定母体庚酮是哪一个异构体的例子[57]；从羰基断裂情况和相应的色谱图，可知羰基在母体中的位置。

表8-14　母体烃及反应结果

催化剂　1%Pd；反应温度　300 ℃；氢气流速　20ml·min^{-1}

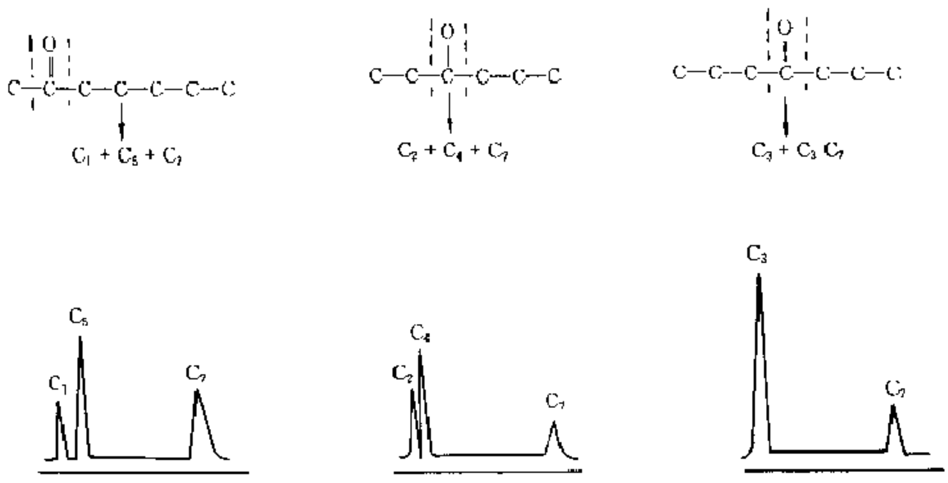
生成母体烃的化合物	反应结果	生成母体烃或少一碳原子的同系物	反应结果
链烷烃	无	醛	RCHO→RH，$RCH_3$①
不饱和化合物	重键的饱和	酸	RCOOH→RH，$RCH_3$①
卤化物	C—X键断裂	酸酐	$(RCO)_2O$→RH，$RCH_3$①
醇（仲、叔）	C—O键断裂	伯醇	RCH_2OH→RH，$RCH_3$①
酯（仲、叔醇基）	C—O键断裂	酯（C—O在第一碳原子上）	$R'COOCH_2R$→RH，RCH_3，R'H，$R'CH_3$①
醚（仲、叔）	C—O键断裂		
酮	C═O键断裂	醚（伯）	RCH_2OCH_2R→RH，RCH_3
胺（仲、叔）	C—N键断裂	酰胺（NH在第一碳原子上）	$R'CONHCH_2R$→RH，RCH_3，R'H，$R'CH_3$①
酰胺（NH在第二、三碳原子上）	C—N键断裂		

①反应结果中不产生或仅产生很少量此母体烃。

三、热解碎法定性法

许多大分子有机化合物在（300～600）℃会发生热解反应。若将热解后易挥发的小分子物质（碎法）引入色谱仪，就会得到指纹热解谱图。由于在一定的热解条件下，化合物与其热解产物的组成和相对含量有对应关系，故其指纹热解图各具有其特征性，因而可作定性的依据。例如3-甲基-2-戊烯和2-乙基丁烯在600 ℃进行热解后，用DC-200柱在120 ℃将热解产物进行色谱分析，得到的指纹热解谱图如图8-15所示，从指纹热解谱图可以很容易地区别这两个己烯异构体。又如不同官能团芳香族化合物热解后，所生成的气体产物如表8-15所示，根据热解后的产物可对芳香族化合物进行判定。现在热解色谱已广泛用于鉴别不同来源和结构

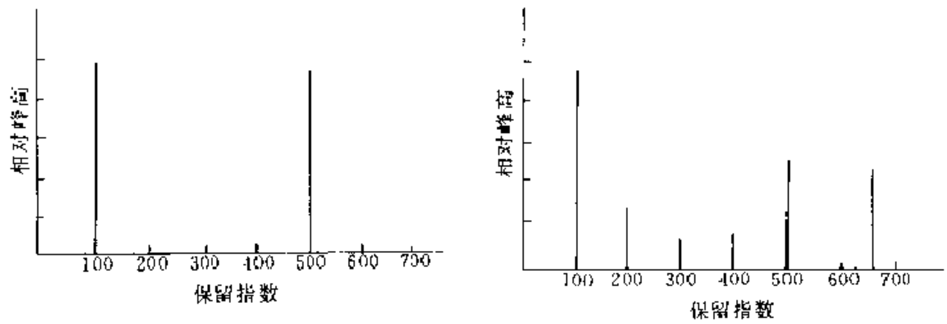
的聚合物、类固醇、植物碱、生物样品等物质。



(a) (b) (c)

图 8-14 庚醇碳结构分析产物的色谱图

(a) 2-庚醇色谱图；(b) 3-庚醇色谱图；(c) 4-庚醇色谱图



(a) (b)

图 8-15 指纹热解谱图

(a) 3-甲基 2 戊烯；(b) 2-乙基-1-丁烯

表 8-15 不同官能团芳香族化合物及其热解的气体产物①

官能团	热解的气体				官能团	热解的气体			
	H_2	CO	CH_4	CO_2		H_2	CO	CH_4	CO_2
—COOH	+	−	−②	+	—$COOC_2H_5$	+	+	+	±
—OH	+	+	+	−③	—Cl	+	−	+	−
NO_2	+	+	−	−	—NH_2	+	−	−	−
—CH_3	+	−	+④	−	—SO_3H	+	−	−	−
—$COOCH_3$	+	+	+	±					

①表中“+”号表示产生，“−”号表示不产生。

②羰酸中的邻位者例外。

③2，6 二硝基苯酚亦产生 CO_2。

④在邻位有甲基和含氧的基团时就不会出现甲烷。

除上述定性方法外，还有元素分析法、分子量法、臭氧法和光解法，均可进一步参见文献［58］的介绍。

应该指出，这些定性方法各有优缺点，最好是尽量利用多种方法综合进行定性。

参 考 文 献

1 Zweig G，Sherma J. CRC HandBook of Chromatography vl. Ohio：CRC Press，1972

2 顾惠祥，阎宝石. 气相色谱实用手册. 第二版. 北京：化学工业出版社，1990

3 卢佩章，戴朝政. 色谱理论基础. 北京：科学出版社，1989

4 Kovats E. Helv Chim Acta. 1958；41：1915

5 Sprouse J F，Varano A. Am Lab. 1984；(9)：54

6 Giddings J C. In Brenner N，Callen J E，Weiss M D，ed. Gas Chromatography. New York：Academic Press，1962：57

7 Guiochon G. Anal Chem，1964；36：661

8 Habgood H W，Harris W E. Anal Chem，1964；36：663

9 Golovnya R V，Urdetz V P. J Chromatogr，1966；36：276

10 Erdey L，Takacs J，Szalanczy E. J Chromatogr，1970；46：29

11 Majlat P，Erdos Z，Takacs J. J Chromatogr，1974；91：89

12 Curvers J，Rijks J，Cramers C，et al. HRC & CC，1985；8：607

13 Curvers J，Rijks J，Cramers C，et al. HRC & CC，1985；8：611

14 Podmaniczky L，Szepesy K，Lakszner K，et al. 1986；21：91

15 Wang Tiansong，Sun Yiliang. J Chromatogr，1987；390：261

16 Wang Tiansong，Sun Yiliang. J Chromatogr，1987；390：269

17 Krupcik J，Cellar P，Repka D，et al. J Chromatogr，1986；351：111

18 Krupcik J，Repka D，Hevesi T，et al. J Chromatogr，1987；406：117

19 Krupcik J，Repka D，Benicka E，et al. J Chromatogr，1988；448：203

20 陈邦杰，郭西见，彭少逸. 色谱，1987；5：335 (1987)

21 Chen Bangjie，Guo Yijian，Peng Shaoyi. Chromatographia，1988；25：539

22 Akporhonor E E，Le Vent S，Taylor D R. J Chromatogr，1987；405：67

23 Akporhonor E E，le Vent S，Taylor D R. J Chromatogr，1987；463：271

24 Akporhonor E E，Le Vent S，Taylor D R. J Chromatogr，1990；504：269

25 Said A S. HRC & CC，1988；11：678

26 Feruandenz-Sanchez N，Garcia-Dominguez J A，Menendez V，et al. J Chromatogr，1990；498：1

27 Guan Y，Kiraly J，Rijks J A. J Chromatogr，1989；427：129

28 Crammers C A. Chromatographia，1981；14：439

29 Van der Dool H，Kratz P D. J Chromatogr，1963；11：463

30 许国旺，张玉奎，卢佩章. 化学学报，1994；52：902

31 许国旺，张祥民，杨黎等. 化学学报，1994；52：910

32 卢佩章，许国旺. 气相色谱专家系统. 济南：山东科学技术出版社，1994

33 Grob R L. Modern Practice of Gas Chromatography. 2nd ed. New York：John Wiley & Sons 1985；51

34 Hawkes S J. Chromatographia，1989；28：237

35 Hawkes S J. Chromatographia，1991；32：211

36 Hawkes S J. Chromatographia，1988；25：1087

37 李浩春，卢佩章. 气相色谱法. 北京：科学出版社，1993

38 Krupcik J，Repka P. Coll Cze Chem Comm，1985；50：1808

39 The Sedtler Standard Gas Chromatography Retention Index Library. Philadelphia，PA：Sadtler research laboratories division of Bio Rad laboratories，1985

40 Kissen Y V，Feulmer G P. J Chrom Sci，1986；24：53

41 Wijesundera R C，Ackamn R G. J Chrom Sci，1989；27：400

42 Lysyuk L S，Korol A N. Chromatographia，1977；10：712

43 Feibusk B, Balan A, Altman B, et al, J Chem Soc, Perkin Trans Ⅱ. 1979; (9): 1199

44 Feibush B, Balan A, Altman B, et al. J Chem Soc, Perkin Trans Ⅱ. 1979; (9): 1230

45 Weinstein S, Feibush B, Gil-Av E. J Chromatogr, 1976; 126: 97

46 Boneva S. Chromatographia, 1987; 23; 50

47 卢佩章, 李浩春. 仪器仪表学报, 1983; 4 (3): 237

48 Oaks D M, Hartmann H, Dimick K P. Anal Chem, 1964; 36: 1560

49 Dawson J H. Anal Chem, 1964; 36: 1852

50 Baker J K. Anal Chem, 1977; 49: 906

51 Hoff J E, Feit E D. Anal Chem, 1964; 36: 1002

52 Ikeda R M, Simmons D E, Grossman J D. Anal Chem, 1964; 36: 2188

53 Walsh J T, Merritt C, Jr. Anal Chem, 1960; 32: 1378

54 Ettre L S, Mc Fadden. Ancillary Techniques of Gas Chromatography, New York: Wiley-Intersci, 1960; 125

55 Dvoretzky I, Richardson D B, Durrett L R. Anal Chem, 1963; 35; 545

56 Beroza M, Coad R. In L S Ettre, Zlatkis A, ed. The Practice of Gas Chromatography. New York: Intersci, 1967; 166

57 Beroza M, Sarmiento R. Anal Chem, 1963; 35; 1353

58 Leathard D A, Shurlock B C. Identification in Gas Chromatography. New York: Wiley-Intersci. 1970

（许国旺）

第九章　定 量 分 析

气相色谱用于组分定量分析时，为了获得准确结果，除将各组分很好地分离外，还要解决以下几个问题：

①准确测量峰面积或峰高；

②确定峰面积或峰高与组分质量（或体积）的关系；

③选择合适的定量计算方法。本章着重叙述这些问题[1,2]。

第一节　色谱峰面积的测量

样品经色谱柱分离后，组分进入检测器，检测器产生相应的输出信号，得到流出曲线。对于积分式检测器，其流出曲线的台阶高度正比于该组分的含量，定量方式简便，这里不讨论。对于微分式检测器，其流出曲线的色谱峰上各点仅表示组分在该瞬间的量，色谱峰曲线与基线间的整个面积才表示该组分的总量，其定量的第一步是确定基线。

一、基线的判断

图 9-1 为确定四种不同情况色谱基线的方法。

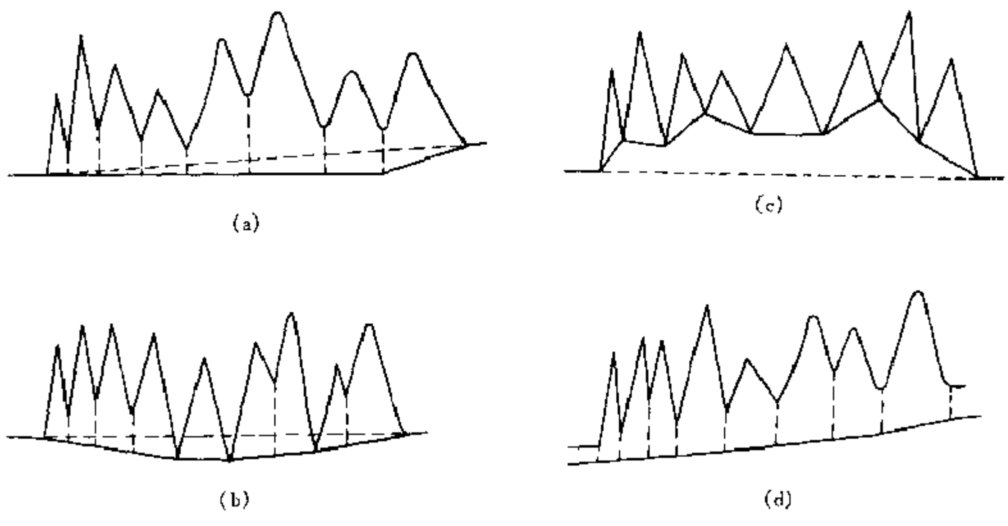


图 9-1　确定色谱基线的方法

(a) 水平基线校正法；(b) 胶带法；(c) 峰谷法；(d) 空白基线校正法

(一) 水平基线校正法

如图 9-1 (a) 所示，水平基线校正法确定基线是从第一个色谱峰的始点与最后一个色谱峰的始点画一直线，然后折上与该峰终点相联，作为色谱的基线。此方法适用于基线平稳的情况。

（二）胶带法

如图 9-1（b）所示，胶带法确定基线是先由第一个色谱峰的始点与最后一个色谱峰的终点作一直线，色谱基线则是由低于此线的各峰谷相连的折线构成。此法适用于基线波动不太大的情况。

（三）峰谷法

如图 9-1（c）所示，峰谷法确定基线是把峰谷之间连线作为基线。此法适用于基线波动很大的情况，定量误差也大。

（四）空白基线法

如图 9-1（d）所示，空白基线法确定基线是在不进样的情况下先作一次色谱分析，其谱图称为空白基线。然后在完全相同的色谱条件下进样分析，此时谱图与空白基线谱图相减，称之为空白基线法。此法主要用于程序升温分析，在积分仪或计算机内进行减扣，在仪器重复性高的情况下，不会给定量带来太大的误差。

二、面积的测量方法

组分的量可以通过峰面积或峰高进行计算。峰高测量可以直接用直尺度量，峰面积的测量则较困难，如何根据不同峰形和不同分离情况准确量出峰面积，是色谱工作者应关注的问题。

（一）对称峰面积的测量

1. 峰高乘半高峰宽法

此法为最普遍使用的方法。如图 9-2 和下式所示，是色谱峰的顶点至基线的距离乘以此距离一半高度的峰宽所得的面积。

$$A_1 = h \cdot w_h \quad (9\text{-}1)$$

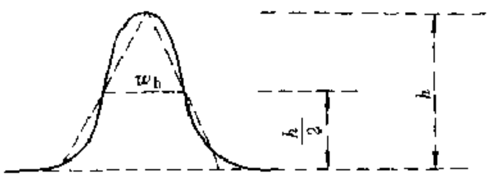


图 9-2　峰高乘半高峰宽法

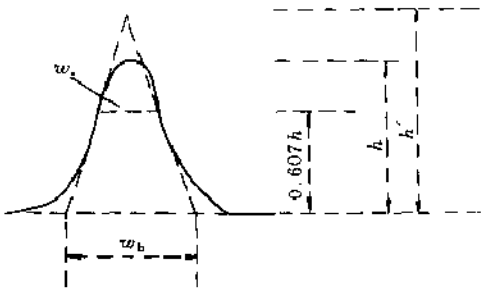


图 9-3　峰高乘峰宽法

2. 峰高乘峰宽法

此法是色谱峰两边拐点的切线与基线的交点所构成的三角形面积，如图 9-3 和下式所示。

$$A_2 = \frac{1}{2}h' \cdot w_b = h' w_t \quad (9\text{-}2)$$

应当指出，色谱峰的真正面积 A 应为

$$A = 1.06A_1 = 1.03A_2$$

在定量计算结果时，系数 1.06 或 1.03 被约去，故对定量分析结果无影响；测量检测器或比表面积时，因要用绝对的峰面积值，则需分别乘以这些系数。

（二）不对称峰面积的测量

1. 峰高乘平均峰宽法

取峰高与在峰高的 0.85 和 0.15 处峰宽平均值的乘积来表示峰面积[3]，如图 9-4 和下式所示。

$$A_3 = h\left(\frac{w_{0.85}+w_{0.15}}{2}\right) \tag{9-3}$$

2. 分割加和法

例如图 9-5 所示，将色谱峰分割成两个较对称的色谱峰，然后将其面积相加。

$$A_4 = A' + A'' = h_1 w_1 + h_2 w_2 \tag{9-4}$$

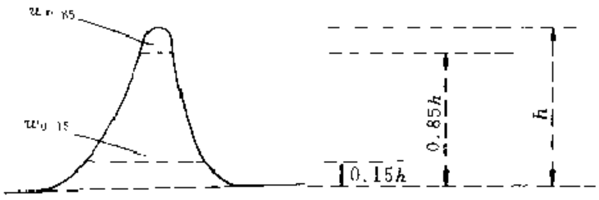


图 9-4 峰高乘平均峰宽法

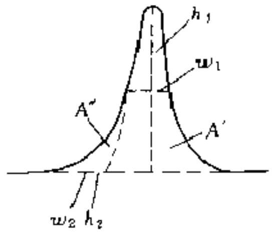


图 9-5 分割加和法

3. EMG 模型法

Foley 依据 EMG 模型法（即假定拖尾峰可以用高斯-指数衰减卷积公式描述），曾提出一些计算峰面积的方法，如图 9-6 和下式所示[4]。

$$A_5 = 0.753h \cdot w_{0.25} \tag{9-5}$$

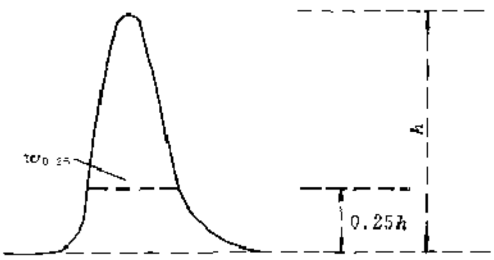


图 9-6 EMG 模型法

（三）大峰尾部小峰面积的测量

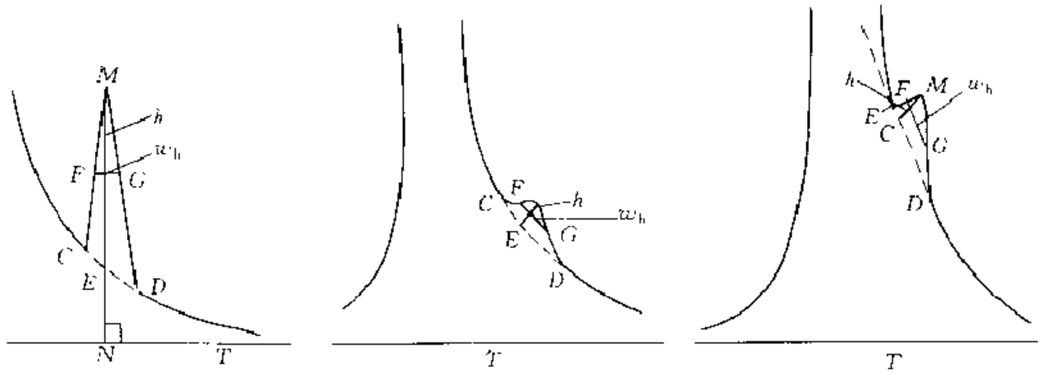
痕量分析时，常遇到溶质峰（小峰）在主峰（大峰）峰尾出现，此时溶质峰的面积可按峰高乘半高峰宽计算，但峰高和半高峰宽须依据不同情况截取、测量。举例如下：

①如图 9-7（a）情况时，可沿主峰峰尾画出溶质峰的峰底，然后从溶质峰峰顶 M 向主峰基线作垂线 MN，交溶质峰底于 E，则 ME 为小峰的峰高 h。在 ME 的中点作主峰基线的平行线，交小峰两侧于 F 和 G，得到的 FG 为小峰的半高峰宽 w_h。

②如图 9-7(b)或 9-7(c)情况时，可以小峰起点 C 和终点 D 的联线为小峰基线，自小峰顶点 M 向 CD（或延长线 DC）作垂线相交于 E，则 ME 为小峰峰高 h，过 ME 的中点作 CD 的平行线，与小峰两侧分别相交于 F 和 G，得到 FG 为小峰的半高峰宽 w_h。

（四）基线漂移时峰面积的测量

此种情况也以峰高与半高峰宽的乘积作为峰面积。当色谱峰较窄时，可按图 9-8（a）绘图。其中 CD 是基线，MN 是峰顶点向时间坐标的垂线；FG 是过 ME 中点与 MN 垂直的线。当色谱峰较宽时，则可按图 9-8（b）或 9-8（c）绘图。图 9-8（b）中的 BH 经过 ME 的中点与 CD 平行，BF、MN 和 HG 均垂直于时间坐标。图 9-8（c）中的 ME 垂直于 CD，而 FG 也经过 ME 的中点与 CD 平行，所得各图的 ME 都是峰高 h，FG 都是半高峰宽 w_h。



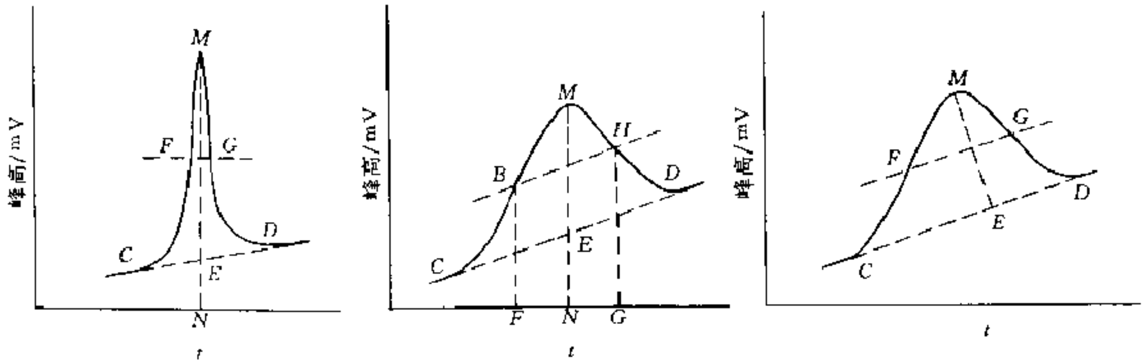
(a) (b) (c)

图 9-7 大峰尾部小峰面积的测量

(a) 自小峰峰顶向主峰峰底作垂线法；

(b) 自小峰峰顶向小峰峰底作垂线，交点在小峰内；

(c) 自小峰峰顶向小峰峰底作垂线，交点在小峰外



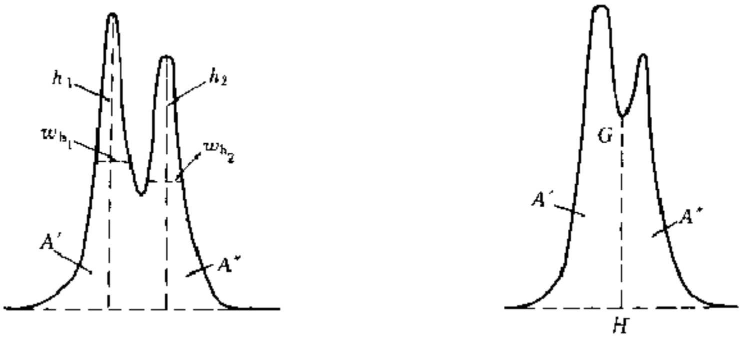
(a) (b) (c)

图 9-8 基线漂移时峰面积的测量

(a) 色谱峰共窄，作图量取峰宽 FG 的方法；

(b) 色谱峰甚宽，作图量取峰宽 FG 的方法；

(c) 色谱峰共宽，作图量取峰宽 FG 的方法



(a) (b)

图 9-9 重合峰峰面积的测量

(a) 峰谷低于小峰的峰半高时；

(b) 峰谷高于小峰的峰半高时

（五）重合峰峰面积的测量

可视两重合色谱峰的交点是在小峰的峰半高之下或之上，分别选择图 9-9（a）或 9-9（b）所示进行测量。须要指出的是，后者两峰的峰高愈接近时，测量误差愈小，否则随两峰高比值增大而增大，就需要用重合峰峰面积校正因子法进行校正[5]，或改用曲线拟合法[6]。

第二节　定量校正因子

一、分　类

气相色谱分析定量的基础，是依据载气携带入检测器中的组分量 Q 与检测器所产生的响应值（色谱峰面积或峰高 h）成正比。如

$$Q=f'A \tag{9-6}$$

式中比例常数 f' 称为该组分的定量校正因子，Q 的单位（随检测器类型不同）采用质量、摩尔或体积表示，于是有质量校正因子 f'_m，摩尔校正因子 f'_M 和体积校正因子 f'_v。校正后的峰面积可以定量地代表该组分的含量。

为了消除定量校正因子在测定时所受的影响，现在多用组分与规定的基准物（参比物质）的相对校正因子于定量分析；因而常用的相对校正因子分别是：

（1）相对质量校正因子

$$f_m=\frac{f'_{mi}}{f'_{M(st)}}=\frac{m_i/A_i}{m_{st}/A_{st}} \tag{9-7}$$

（2）相对摩尔校正因子

$$f_M=\frac{f'_{Mi}}{f'_{M(st)}}=\frac{\left(\frac{m_i}{M_i}\right)/A_i}{\left(\frac{m_{st}}{M_{st}}\right)/A_{st}}=f_m\frac{M_{st}}{M_i} \tag{9-8}$$

（3）相对体积校正因子

$$f_v=\frac{22.4\left(\frac{m_i}{M_i}\right)/A_i}{22.4\left(\frac{m_{st}}{M_{st}}\right)/A_{st}}=f_M \tag{9-9}$$

式中 M 为相对分子质量，标准状态下气体的摩尔体积为 $22.4L\cdot mol^{-1}$。

上述公式（9-7）至式（9-9）中用的是色谱峰面积，也可将其改用色谱峰峰高；分别称之为相对面积校正因子和相对峰高校正因子。

当物质的相对校正因子是以物质 s 作为基准物，欲换成以物质 ϕ 为基准物时，有

$$f_{m(i,\phi)}=f_{m(\phi,s)}/f_{m(i,s)} \tag{9-10}$$

$$f_{M(i,\phi)}=f_{M(\phi,s)}/f_{M(i,s)} \tag{9-11}$$

氢火焰离子化检测器多用正庚烷作基准物，热导检测器则多用苯作为基准物。

相对校正因子的数值可以通过查文献获得。在第十三章提供了一部分相对校正因子数值。由于物质的校正因子数值有些不仅随检测器和载气的不同而异，而且受物质的浓度和检测器的结构影响，所以定量分析时，应该用自己测定的定量校正因子，只有在要求不高或无纯物质时才使用文献发表的数值。

热导检测器用氢气与氦气作载气时，相对校正因子数值基本可以通用，误差不超过3%[7]。热导池结构、热敏元件、热丝温度和检测器温度对相对校正因子的数值无大影响[7]，氢

火焰离子化检测器载气种类对相对校正因子数值无大影响，但不同类型化合物的相对校正因子受氢火焰离子化检测器的结构[8]、载气与燃气的流速[9]及操作压力[10,11]的影响较大。电子捕获检测器在组分浓度很低时，输出信号与组分浓度 C 近似地成线性关系。

$$\Delta I = K'C$$

式中比例常数 K' 与许多参数（如检测器的结构、尺寸；放射源的种类；载气种类、流速；极化电压形式；脉冲条件等）有复杂的关系。因此文献上报道的相对响应值可作为参考，但不可作为定量的依据[12]，而文献提供的相对电子吸收系数，可作为电子捕获检测器相对响应值大小的参考。

前已述及，组分通过检测器所产生信号的大小称为响应值；单位量物质与单位量参比物质（基准物）的响应值之比称为相对响应值。在文献上常可查到相对响应值的数据，它们与相对校正因子互为倒数关系。

$$s_m = \frac{1}{f_m} \tag{9-12}$$

$$s_M = \frac{1}{f_M} \tag{9-13}$$

$$s_v = \frac{1}{f_v} \tag{9-14}$$

Rosie 等[13]曾提出摩尔响应值的概念，所定义的 RWR 值与 RMR 值及相对校正因子的关系如下：

$$RWR = \frac{1}{f_m} \tag{9-15}$$

$$RMR = \frac{1}{f_M} \times 100 \tag{9-16}$$

及有

$$RMR = RWR \cdot \frac{M_i}{M_{st}} \times 100 \tag{9-17}$$

二、定量校正因子的测定方法

精确称取组分与基准物，并将配成的混合液进行色谱分析，然后将所得峰面积值代入公式（9-7），就可得到组分的相对质量校正因子。若代入公式（9-8）和（9-9），则分别得到组分，相对摩尔校正因子和相对体积校正因子。

三、相对校正因子的估算方法

在既无纯组分可进行测定，又查不到文献数据时，则利用下述一些方法进行估算。

（一）热导检测器相对校正因子的估算

1. 分子量规律法

同系物组分的相对摩尔响应值与其相对分子质量之间有线性关系[11]，如图 9-10 所示。

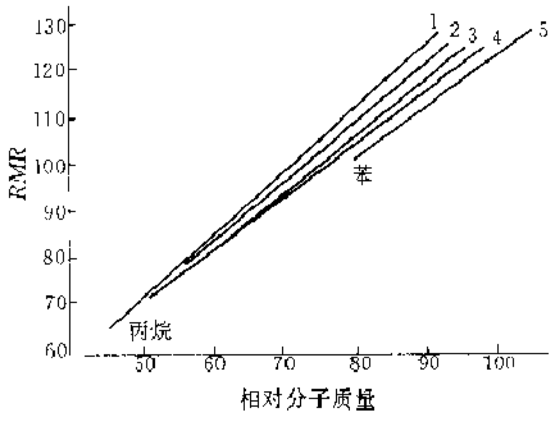


图 9-10 热导检测器上 RMR 值与相对分子质量的关系

1—直链烃；2—甲基取代烃；3—二甲基取代烃；4—三甲基取代烃；5—甲基苯

可以写出相应的估算公式

$$RMR_{(i,st)}=F_1M_i+G_1 \tag{9-18}$$

式中，M_i 是物质 i 的相对分子质量；F_1 与 G_1 是同系物的特征常数。表 9-1 列出用苯作基准物时，一些同系物的 F_1 与 G_1 值。

表 9-1　同系物物质的 G_1 与 F_1 值

同系物	组　分	截距/G_1	斜率/F_1	同系物	组　分	截距/G_1	斜率/F_1
正构烷烃	$C_1\sim C_{10}$	6.7	1.35	伯醇	$C_2\sim C_7$	34.9	0.808
甲基烷烃	$C_4\sim C_7$	10.8	1.25	仲醇	$C_3\sim C_5$	33.6	0.857
二甲基烷烃	$C_5\sim C_7$	13.0	1.20	叔醇	$C_4\sim C_5$	31.8	0.808
甲基苯类	$C_7\sim C_9$	9.7	1.16	正乙酸酯	$C_2\sim C_7$	37.1	0.841
正酮类	$C_3\sim C_4$	35.9	0.861	正醚类	$C_4\sim C_{10}$	43.3	0.886

除了同系物中第一、二成员与直线有较大偏差外，根据这一规律，可由同系物中某二成员的 *RMR* 值推算出其他成员的 *RMR* 值。

同样，同系物组分的 *RMR* 值与组分的碳数之间也存在与式（9-18）相似的关系[15]。

2. 碳数规律法

同系物的相对质量响应值 s_m 对分子中的碳原子数作图，得到一条渐近线的关系曲线，见图 9-11。

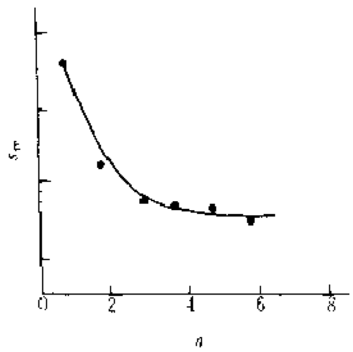


图 9-11 正构烷烃碳数（n）与 s_m 值关系图

曲线在碳数较大处呈水平趋势，这意味 s_m 值趋于相同。即分析分子量相差不大或分子量较大的一些同系物样品时，可直接用它们各自的面积进行定量计算。分析碳数范围较宽的样品时，较低碳数的同系物（如 $C_1\sim C_3$）的 s_m 值与较高碳数同系物的 s_m 值相差较大，在定量计算时，必须采用相对质量校正因子进行校正。

3. 基团截面积法

Littlewood 等指出[16]，一般情况下，醇、醛、酮、醚、酯及卤素等极性化合物的 *RMR* 值等于构成该化合物各个基团的 *RMR* 值之和。计算时可将各结构基团的 *RMR* 相加。部分基团的 *RMR* 值见表 9-2。

例如乙酸乙酯的 *RMR* 值的计算，因其分子式为

$$CH_3-\underset{\underset{O}{\|}}{C}-O-CH_2-CH_3$$

由分子式可知乙酸乙酯含 2个 $-CH_3$，一个 $-CH_2-$，与一个 $-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-O-$ 基团，查表 9-2，得到

$$RMR=2\times12+1\times11+1\times77=112$$

实验值为 111。用此法进行计算时，计算值与实验值一般吻合良好，误差约为±3%。

表 9-2　部分基团的 *RMR* 值

基　团	*RMR* 值	基　团	*RMR* 值	基　团	*RMR* 值	基　团	*RMR* 值
CH_3-	12	—H	1	-C—OH	60	F(端基)	57
—CH_2—	11	—O	62	—CH—OH	61	Cl(端基)	67
-CH	10	-C=O	64	CH_2—OH	62	Br(端基)	74
—C-	9	O—C=O	77	—C_6H_5	99	I(端基)	83

4. 分子直径法

Barry 等[17~19]根据分子碰撞理论提出氢气、氦气作载气，以苯作基准物时，RMR 值的计算公式为：

$$RMR_{苯}=\left[\frac{\sigma_i+\sigma_{载}}{\sigma_{苯}+\sigma_{载}}\right]^2\left[\frac{M_i-M_{载}}{M_{苯}-M_{载}}\right]^{1/4}\times 100 \tag{9-19}$$

式中下标 i、载、苯分别表示组分、载气、苯，M 表示相对分子质量；σ 表示分子碰撞直径。

$$\sigma=2.3647\ (T_c/P_c)^{1/3} \tag{1}$$

或

$$\sigma=0.561V_c^{5/12} \tag{2}$$

而式中 T_c、T_p、V_c 分别表示临界温度（K），临界压力（Pa）和临界体积（$cm^3\cdot mol^{-1}$），可以从物理手册查出。部分物质的 σ 值见表 9-3。

表 9-3 各类物质的碰撞直径

化合物	(1) 式	(2) 式	化合物	(1) 式	(2) 式	化合物	(1) 式	(2) 式
正戊烷	5.71	5.85	正壬烷	7.04	7.39	丙酮	5.23	5.40
正己烷	6.07	6.25	苯	5.34	5.45	氦	3.14	3.11
正庚烷	6.41	6.66	甲苯	5.73	5.89	氢	3.25	3.22
正辛烷	6.73	7.03						

例如用氦气作载气，计算正己烷的 RMR 值时，可由表 9-3 查得：

$\sigma_{He}=3.14$ (1)，3.11 (2)；

$\sigma_{己烷}=6.07$ (1)，6.25 (2)；

$\sigma_{苯}=5.34$ (1)，5.45 (2)；

而 $M_{He}=4.00$；$M_{苯}=78.11$；$M_{己烷}=86.18$。

按（1）式计算 $RMR_{苯}=\left[\frac{6.07+3.14}{5.34+3.14}\right]^2\left[\frac{86.18-4.00}{78.11-4.00}\right]^{1/4}\times 100=121.00$

按（2）式计算 $RMR_{苯}=\left[\frac{6.25+3.11}{5.45+3.11}\right]^2\left[\frac{86.18-4.00}{78.11-4.00}\right]^{1/4}\times 100=122.67$

实验值为 123，与以上计算值比较，误差皆小于 2%。

（二）氢火焰离子化检测器相对响应值的计算

1. 碳数规律

同系物的相对摩尔响应值与其分子中碳原子数 n 呈线性规律

$$RMR_{苯}=G_2+F_2n_i \tag{9-20}$$

式中 G_2、F_2 为同系物的特征常数，n_i 为组分 i 的碳原子数。一些同系物的 G_2、F_2 见表9-4。

表 9-4 不同类型同系物的 G_2 与 F_2 值

类型	碳数范围	截距/G_2	斜率/F_2	类型	碳数范围	截距/G_2	斜率/F_2
直链烷烃	C_1~C_{15}	0	14.3	直链酮类	C_3~C_9	−13.9	11.3
直链烯烃	C_2~C_{15}	0	14.0	支链酮类	C_5~C_9	6.42	10.7
环烷烃	C_1~C_9	0	14.0	脂肪酸	C_1~C_8	−13.3	11.3
支链烷烃	C_5~C_{10}	12.7	12.7	脂肪酸甲酯	C_1~C_{10}	22.9	14.8
直链芳烃	C_6~C_{12}	18.4	11.45	甲酸酯	C_1~C_5	−15.2	13.8
甲基取代芳烃	C_7~C_{12}	26.8	10.3	乙酸酯（直链）	C_1~C_6	−22.9	14.3
伯醇	C_1~C_{10}	−6.07	13.8	乙酸酯（支链）	C_3~C_6	−20.2	14.0
仲醇	C_3~C_6	−10.2	14.0	甲基丙烯酸酯	C_1~C_5	−6.32	11.5
叔醇	C_4~C_6	−0.96	13.8	直链取代酚类	C_6~C_{10}	8.1	8.1
多元醇	C_2~C_5	5.95	4.95	烷基磺酸甲酯	C_1~C_5	0	14.0
醛类	C_1~C_{10}	−9.4	13.4	脂肪胺类	C_1~C_8	−12.0	13.6

同样，同系物的 *RMR* 与其分子量之间也有类似的关系。

2. 有效碳数规律

对于不同类型的化合物的相对质量校正因子，可以利用有效碳数规律进行计算[20~23]。

$$f_{m(i,s)}=\frac{\sum C_{有效(s)}}{\sum C_{有效(i)}}\cdot\frac{M_i}{M_s} \tag{9-21}$$

上式中的 i、s 分别表示组分和基准物。

各原子在不同化合物或基团中所体现的有效碳数见表 9-5。

表 9-5　不同类型物质有效碳数的数值

原　子	物质的类型	有效碳数的数值	原　子	物质的类型	有效碳数的数值
C	烷烃	1.0	O	仲醇	-0.75
C	芳烃	1.0	O	叔醇	-0.25
C	烯烃	0.95	O	酯类	-0.25
C	炔烃	1.30	Cl	在烷基上有二个或二个以上的氯	-0.12（每个）
C	羰基	0.0			
C	羧基	0.32	Cl	在烯烃碳原子上的氯	0.05
C	腈基	0.3	N	胺类	同相应醇上的 O 原子
O	醚类	-1.0			
O	伯醇	-0.6			

例如以正庚烷为基准物，计算丙酸和丁酮的 f_m，由于丁酮分子式为 $CH_3—CH_2—\overset{\overset{\displaystyle O}{\|}}{C}—CH_2$

丙酸分子式为　$CH_3—CH_2—\overset{\overset{\displaystyle O}{/\!\!/}}{C}—OH$

查表 9-5 知，$\sum C_{有效(正庚烷)}=7$；$\sum C_{有效(丙酸)}=2+0.32=2.32$；$\sum C_{有效(丁酮)}=3+0=3$

又 $M_{丁酮}=72.11$　$M_{正庚烷}=100.21$　$M_{丙酸}=74.08$

故

$$f_{m(丙酸)}=\frac{7}{100.21}\times\frac{74.08}{2.32}=2.23$$

$$f_{m(丁酮)}=\frac{7}{100.21}\times\frac{72.11}{3}=1.68$$

而文献值　$f_{m(丙酸)}=2.50$，$f_{m(丁酮)}=1.64$

对于不含杂原子的烃类化合物，如烷、烯、芳烃类化合物，从表 9-5 可以看出，其有效碳数近似为 1，所以在定量分析时，通常近似地认为其相对质量校正因子为 1，直接可以用峰面积或峰高进行运算。这给石油炼制、石油化工及其产品的分析带来极大的方便。

（三）截面积离子化检测器相对校正因子的计算

截面积离子化检测器为放射性离子化检测器，其相对摩尔响应值 s_M 可由下式计算：

$$s_M=\frac{\theta_i-\theta_c}{\theta_{st}-\theta_c} \tag{9-22}$$

上式中 θ_i、θ_c、θ_{st} 分别为组分、载气、基准物分子的有效截面积值。

物质的分子截面积值可由组成它的元素的原子截面积加和而得。部分原子和分子的截面积值见表 9-6。用 H_2 作载气时，s_M 的计算值与实际值非常接近。

表 9-6 元素或化合物的原子或分子有效截面积

元素或组分	有效截面积 /Sr⁹⁰	有效截面积 /H³	元素或组分	有效截面积 /Sr⁹⁰	有效截面积 /H³	元素或组分	有效截面积 /Sr⁹⁰	有效截面积 /H³
H	1.00	1.00	Cl	11.80	—	CO_2	10.74	—
C	4.16	3.69	Ar	10.90	9.98	C_2H_4	12.32	—
N	3.84	3.20	He	0.694	—	C_2H_6	14.32	—
O	3.29	4.56	Ne	1.75	—	Kr	17.4	—
F	1.85	4.08	CO	7.45	—	Br	18.0	—
S	12.80	8.75	CH_4	8.17	—	Xe	24.1	—

第三节 定量计算方法与准确度

根据色谱图进行定量分析时，主要计算方法有归一化法、内标法、外标法和叠加法四种，可用于不同情况。

一、归一化定量法

归一化定量法适用于样品中所有组分都能从色谱柱内流出并被检测器检出，同时又能测定或查出所有组分的相对校正因子。

$$X_i=\frac{f_iA_i}{\sum f_iA_i}\times 100\% \tag{9-23}$$

式中 X_i、A_i、f_i 分别表示组分 i 的百分含量、峰面积和相对校正因子。

归一化定量法的结果与进样准确度无关，仪器与操作条件稍有变动所致的影响亦不大。故此法的定量结果比较准确。

当所有组分的相对校正因子都相同时，上式可简化为

$$X_i=\frac{A_i}{\sum A_i}\times 100\% \tag{9-24}$$

这种情况的定量方法，特称为面积归一化定量法，是上述归一化定量法的特例。

二、外标定量法

外标定量法是先用组分 i 的纯物配制一系列不同浓度的标准样，进行色谱分析，作出峰面积对浓度的工作曲线，然后在相同的色谱条件下，注射相同量的试样进行色谱分析，求出峰面积，根据工作曲线查得组分 i 的含量。

若工作曲线通过原点，可以使用下式计算：

$$X_i=\frac{A_i}{A_E}\cdot E_i \tag{9-25}$$

式中，X_i、A_i 分别为试样中组分 i 的含量和峰面积；E_i、A_E 分别为标准样中组分 i 的含量和峰面积。

此方法虽然操作简单，计算方便，但色谱分析所用条件必须严格一致，且要求配制标准样物质的色谱纯度很高。

若配制标准样的化合物为物质 s，即与所测组分 i 不相同时，亦有类似的公式可用，但需对峰面积进行校正。

$$X_i=\frac{f_iA_i}{f_sA_s}\cdot X_s \tag{9-26}$$

式中，X_i、f_i、A_i是试样中组分i的含量、相对校正因子和峰面积，X_s、f_s、A_s是标准样中物质s的含量、相对校正因子和峰面积。

三、内标定量法

将被称为内标物的物质s加入到样品中，进行色谱分析后，用组分i和内标物s各自的相对校正因子校准其峰值，按下式计算组分i质量百分含量的方法，就是内标定量法。

$$X_i=\frac{m_s}{m}\cdot\frac{f_iA_i}{f_sA_s}\times 100\% \tag{9-27}$$

式中X_i、A_i、f_i分别为试样中组分i的质量百分含量、峰面积和相对校正因子，m_s、A_s、f_s分别为内标物s的质量、峰面积和相对校正因子、m为试样的质量（不包括m_s）。

内标定量法的优点是定量准确；只需欲测定的组分能从色谱柱流出和被检测器检出即可定量。选作内标物的物质、只要求其能与样品互溶，和能与所有组分完全分离。内标物的浓度宜与被测组分浓度相近，且内标物的色谱峰的位置，最好邻近待测组分色谱峰。此方法的缺点是操作麻烦。

内标定量法的一个特例是叠加定量法，系用样品组分中的纯物质作为内标物的一种变通办法。实验步骤是：先将样品进行一次色谱分析，得到一个色谱图，然后称取样品质量为m，将组分中的纯物质m_ϕ（即叠加物）加入其中，并在与上述相同的色谱条件下进行一次色谱分析，得到另一个色谱图。从这两个色谱图可知原样品中组分i与组分ϕ的色谱峰面积分别为A_i与A_ϕ，和加入叠加物后的色谱峰面积A'_i与A'_ϕ。而加入叠加物后组分ϕ的峰面积应为样品中组分ϕ的实际峰面积a与加入叠加物后增加的峰面积a'之和，即$A'_\phi=a+a'$。

因为
$$a=\frac{A'_i}{A_i}\cdot A_\phi$$

及
$$a'=A'_\phi-a=A'_\phi-\frac{A'_iA_\phi}{A_i}$$

故将a与a'值以及其他相应数值代入式（9-28）与式（9-29），就可分别求出样品中组分i与组分ϕ的定量结果。

$$X_i=\frac{m_\phi}{m}\cdot\frac{A'_if_i}{a'f_\phi}\times 100\% \tag{9-28}$$

$$X_\phi=\frac{m_\phi}{m}\cdot\frac{af_\phi}{a'f_\phi}\times 100\%$$
$$=\frac{m_\phi}{m}\cdot\frac{a}{a'}\times 100\% \tag{9-29}$$

以上所有定量是以峰面积为基准进行的，也可以同样以色谱峰峰高为基准进行计算。用峰高作定量计算时，对处理窄的色谱峰尤其优越。用空心柱分析样品时常采用峰高作定量计量，不仅方便，且可提高定量的精确度。

各种定量方法的比较见表9-7。文献［1，2，24］对以上各方法的优缺点都有评述。

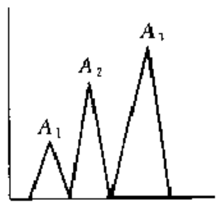
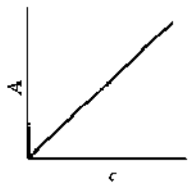
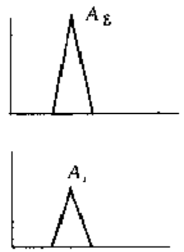
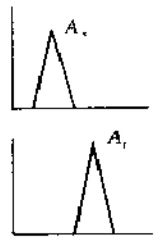
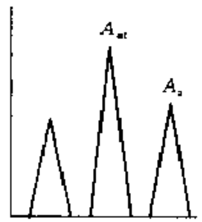
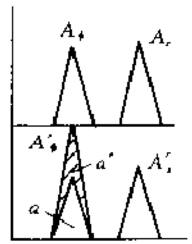
四、影响定量准确度的主要因素

造成气相色谱定量分析偏差的原因很多[1]，除粗差外，由于样品、仪器或操作等造成系统误差和随机误差主要有以下几个因素：

①样品的代表性和稳定性；

②进样的重复性，是否瞬间完全气化无分解，分流时是否有歧视效应；

表 9 7　各种定量方法的比较

	归一化定量法与归一化面积定量法	外标定量法			内标定量法	
		用标准曲线	外标物与组分 i 相同	外标物与组分 i 不同	内标法	叠加法
示意图						
计算公式	公式(9 23)或(9 24)	查曲线直接得结果	公式(9-25)	公式(9-26)	公式(9-27)	公式(9-28),(9-29)
进样量	要求不严	要求准确、固定进样量	二次进样要准确，最好相同	二次进样要准确，最好相同	要求不严	二次进样操作条件严格相同
标准样品	不需要	要有与所测组分相同的色谱纯样	要有与所测组分相同的色谱纯样	要色谱纯外标物或外标样	要色谱纯内标物	要有与所测组分 ϕ 相同的色谱纯样
校正因子	需要所有组分的相对校正因子	不需要	不需要	需要	需要	仅组分 ϕ 不需要
分离要求	所有组分都能流出柱子并能分开	只要被测组分能与其他组分分开	只要被测组分能与其他组分分开	只要被测组分能与其他组分分开	被测组分，内标物与其他组分分开	被测组分 i 与其他组分及组分 ϕ 分开
检测器性能	对所有组分都有输出信号并在线性范围内	只要被测组分有输出信号	只要被测组分有输出信号	只要被测组分有输出信号	对被测组分与内标物有输出信号	对被测组分 i 及组分 ϕ 有输出信号
各组分定量误差的相互影响	相互影响大，尤其各组分浓度相差大时	无	无	无	无	无
应用范围	对仪器要求不严，适于常量分析	方法简单，但要有色谱纯样，对仪器稳定性要求高	临时分析用，色谱条件要求严格相同	临时分析用，色谱条件要求严格相同	对仪器要求不高，但要选择合适内标物，定量精度高	对仪器要求稳定性好，色谱操作严格相同，适于微量分析

③样品经过的色谱系统是否有吸附、分解；

④峰面积或峰高判断和测量的准确性；

⑤检测器的工作条件及色谱条件的稳定性。这些都会影响定量的结果。通常气相色谱法定量分析允许的偏差范围如表 9-8 所示。

表 9-8　气相色谱法定量分析的允许标准偏差范围

试样浓度[1]/%	标准偏差 σ/%	试样浓度[1]/%	标准偏差 σ/%
0.01～0.05	<100	3～10	3～5
0.05～0.5	<50	10～30	2～3
0.5～3	5～10	>30	<2

①可以是质量分数或体积分数。

在分析工作最后处理分析数据时，正确地解决数据的取舍，是色谱工作者经常遇到的重要问题，这部分可参阅文献［25～27］。

参 考 文 献

1　李浩春，卢佩章．气相色谱法．北京：科学出版社，1993

2　顾惠祥，阎宝石．气相色谱实用手册．第二版．化学工业出版社，1990

3　Condal-Bosh L．J Chem Edu，1964；41：A235

4　Foley J P．Anal Chem，1987；59：1984

5　Proksch E，Bruneder H，Granzner V．J Chrom Sci．1967；7：473

6　李浩春，林彬生，罗春荣等．中国科学（B 辑），1985；5：419

7　Rosie D M，Barry E F．J Chem Sci，1973；11：237

8　Novak J，Bocek P，Kepetand L，et al．J Chromatogr．1970；51：385

9　Hanova O，Bocek P，Novak J，et al．J Gas Chrom，1967；5：401

10　Bocek P，Novak J，Janak J．J Chromatogr，1969；43：431

11　Bocek P，Novak J，Janak J．J Chromatogr，1970；48：412

12　Devaux P，Guiochon G．J Gas Chrom，1967；5：341

13　Rosie D M，Grob R L．Anal Chem，1957；29：1263

14　Messner A E，Rosie D M，Argabright P A．Anal Chem，1959；31：230

15　Carson J W，Lege G．J Chrom Sci，1975；13：109

16　Littewood A B．Nature，1959；184：1631

17　Barry E F，Rosie D M．J Chromatogr，1971；59：269

18　Barry E F，Rosie D M．J Chromatogr，1971；63：203

19　Barry E F，Rosie D M．Anal Chem，1972；44：1559

20　Sternberg J C，Gallaway W S，Jones D T L．In Brenner N，Callen J E，Weiss M D，ed．Gas Chromatography．New York：Academic Press，1962；231

21　Perkin G，Jr，Rouayheb G M，Lively L D，et al．In Brenner N，Callen J E，Weiss M D，ed．Gas Chromatography．New York：Academic Press，1962；269

22　Ackman R C．J Gas Chrom，1964；2：173

23　Scanlon J T，Willis D．J Chrom Sci，1986；23：333

24　吴采樱，曾昭睿．现代毛细管气相色谱法．武汉：武汉大学出版社，1990

25　杭州大学化学系分析化学教研室．分析化学手册（第二版）第一分册：基础知识与安全知识．北京：化学工业出版社，1997

26　李浩春．实用数据处理．青岛：青岛海洋大学出版社，1993

27　秦建侯，邓勃，王小芹．分析测试数据统计处理中计算机的应用．北京：化学工业出版社，1990

（叶　芬）

第十章　仪器的调试与维修

在第三章中，我们曾对许多类型气相色谱仪作了介绍，从中可知这些不同的色谱仪既有共性也有各自的个性；在第七章中，我们还对常用的检测器作了叙述；本章则就这些气相色谱仪所遇到的共同的调试与维修事项，作些说明。不同仪器的特殊事项，则应依其各自使用手册处理。

第一节　仪器的调试

一、准备工作

作好仪器调试人员的组织工作。选择的实验室其室温宜在（10～35）℃、相对湿度<85%范围、室内无腐蚀性气体和强磁场，宜有排气装置、氢气报警器和去湿设备，最好有单独的稳压电源供电。

开启仪器包装箱前，首先检查包装箱有无损坏，若有损坏则要作好记录；开箱后按装箱单清点和检查所收到的物件，如有问题，应立即与供货厂商联系。

认真阅读仪器安装说明书，将仪器放在稳固的工作台上，连接好气路和电路，切勿接错地线、火线和零线（英国规定绿/黄色是地线，褐色是火线，蓝色是零线；美国规定绿色是地线，黑色是火线，白色是零线）。

二、气路的考查

（一）气路系统

通氮气入气路系统，观察气流是否通畅，然后关闭出口处，当充满（0.3～0.5）MPa氮气后，关闭气体入口处，观察系统是否漏气。当气压平稳后0.5h内下降不超过0.1MPa为合格。可用十二烷基磺酸钠水溶液检查何处漏气。

（二）流量精度

用稳压阀和稳流阀调节适当的气体流速，稳定后用皂膜流量计或数字式流量计进行测量，连续测定6次，取平均值，其相对标准偏差应不大于1%，或达到说明书所列指标。

三、电器件的考查

（一）绝缘性

用兆欧表检查仪器各部件的绝缘性。启动仪器通电总开关一段时间后，仪器应无过热和漏电情况。

（二）温度控制器

用铂电阻温度计或水银温度计作测温用具，在通气状态下分别考察用于气化室、色谱炉、检测器的温度控制器。观察控制的稳定性，比较设定值与仪表显示值是否一致。应重点注意色谱炉的考察，如

①炉温分布　色谱炉内的温度梯度，在150℃时，一般小于0.5℃，在400℃时小于2.5℃。

②恒温稳定性　测定控制炉温在 40℃和 320℃时的波动情况。温度恒定后波动范围应在 ±0.1℃和±0.25℃以内。

③程序升温的线性与重复性　设定几个升温程序进行试验，观察升温过程中炉温的滞后情况，升温转为恒温时的炉温转折情况，比较设定条件与实测结果的符合程度。

④炉温冷却速度　保持炉温在 400℃下 1h，然后降至 200℃约需 8min，降至比室温高 20℃约需 24min（包括平衡时间 3min）为佳。

（三）检测器

对于热导控制器，要检查电桥有否损坏，通气与通电流下的稳定性，以及调节“零调”、“池平衡”、“衰减”、“倒相”是否正常。

对于微电流放大器，则重点检测衰减器的误差。在仪器稳定时，将固定的电压值输入，把衰减置于不同的档值，误差应小于 1%。

（四）记录器

只要记录器的偏移与输入信号电压是线性关系，走纸的速度均匀，就是正常。必要时调节仪器的“阻尼”和“灵敏度”，使其达到最佳状态。

四、检测器的测试

以下简述测试 TCD、FID、FPD、ECD 的一些事项。

（一）测试条件

使用填充色谱柱测试时，所用的色谱柱长（1～2）m，内径（2～3）mm，内盛的固定相为 5%OV-101 涂于上海试剂厂 101 白色硅烷化载体（粒度 80 目～100 目）。操作条件及试样如表 10-1 所示。

表 10-1　测试检测器的操作条件及试样

项目		TCD	FID	FPD	ECD
温度	t_c/℃	70	160	210	210
	t_V/℃	120	230	230	230
	t_D/℃	100	200	230	230（对 ^{63}Ni）
载气	气体	H_2	N_2	N_2	N_2
	F_c/ml·min^{-1}	30～60	50	50	30～60
试样	组成	每 1ml 甲苯中含 5mg 苯	每 1μl 异辛烷中 100ng 正十六烷	每 1μl 乙醇中 10ng 甲基对硫磷	每 1μl 正己烷中 0.1ngγ-六六六
	进样量/μl	2	2	2	2

（二）基线漂移与噪声的检定

按表 10-1 所示操作条件启动色谱仪，待仪器稳定后，将衰减置于最灵敏档，并使输出的信号（基线）调至记录器的中间位置，取基线在 30min 的变化结果，直接测量出噪声（cm）和漂移（cm·30min^{-1}）的数据，并乘以记录器的灵敏度（mV·cm^{-1}），则得到噪声（mV）和漂移（mV·30min^{-1}）的数值。若 FID 与 FPD 的噪声和漂移值需分别用 A 和 A·30min^{-1}作单位表示时，则应进一步乘以放大器的高阻（A·mV^{-1}）值。

（三）线性范围的检定

用表 10-2 所列各种浓度的标准物试样，测试相对应的检测器，每次进样量为 2μl，各种浓度试样各进样 3 次，并计算所得峰面积的算术平均值。在双对数坐标纸上作峰面积与浓度的

关系曲线，求出保持线性响应所允许的标准物的最大和最小浓度。最大与最小浓度之比即为线性范围，其相关系数应大于 0.9。

表 10 2　检定各检测器线性范围所对应的标准物

检测器		TCD	FID	FPD（P 型）	ECD
标准物	名称	苯-甲苯	正十六烷-异辛烷	甲基对硫磷-无水乙醇	γ-六六六-正己烷
	浓度单位	$mg \cdot ml^{-1}$	$ng \cdot \mu l^{-1}$	$ng \cdot \mu l^{-1}$	$ng \cdot \mu l^{-1}$
	浓度值	0.1	0.1	0.1	0.001
		0.5	1	1	0.01
		5	10	10	0.1
		50	100	100	1
		500	1000	1000	10
			10000		

（四）灵敏度的检定

1. 浓度型检测器的灵敏度

浓度型检测器灵敏度的计算公式为

$$S_t=\frac{F_d}{M_t}\cdot A$$

式中，A 为标准物（试样）的色谱峰面积，$mV \cdot min$；F_d 是检测器温度和柱出口压力下的载气体积流量，$ml \cdot min^{-1}$；M_t 为标准物的进样量。

检测器灵敏度 S_t 的单位依 M_t 的单位而定。当 M_t 表示体积单位为 ml 时，S_t 是检测器的体积灵敏度 S_v，其单位定义为每 1ml 载气中含一定量（ml）标准物时所产生的信号值（mV）；当 M_t 表示质量单位为 mg 时，S_t 是检测器的质量灵敏度 S_g，其单位定义为每 1ml 载气中含一定量（mg）标准物时，所产生的信号值（mV）。

在实际工作中，通常按 Dimbat 等[5]提出的方法用下式计算灵敏度。

$$S_t=\frac{F_d}{M_t}\cdot\frac{U_2}{U_1}\cdot A_t$$

式中，U_1 为记录纸移动的速度（$cm \cdot min^{-1}$）；U_2 为记录器的灵敏度（$mV \cdot cm^{-1}$）；A_t 是实测的色谱峰面积，单位为 cm^2，故有

$$A=\frac{1.065U_2}{U_1}\cdot A_t$$

为了降低 A_t 的测量误差，用记录器绘出的色谱峰，其半高峰宽不可小于 5mm，峰高不低于记录器满量程的 60%。

TCD 与 ECD 是浓度型检测器，在测定灵敏度时，分别用苯-甲苯和 γ-六六六-正己烷试样，进样量为 2μl，连续进样 6 次，获得苯和 γ-六六六峰面积算术平均值，按上述公式计算出相应的灵敏度。

2. 质量型检测器的灵敏度

质量型检测器灵敏度的计算公式为

$$S_t=\frac{A}{m_t}$$

式中，A 的单位为 $A \cdot s$；m_t 的单位为 mg。但从色谱图测定质量型检测器的灵敏度时，使用以下公式：

$$S_t = \frac{60U_2}{m_t U_1} \cdot A$$

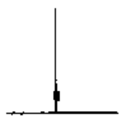
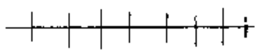
且将其单位换算成每 1s 通过检测器的标准物的量（g）所产生的信号（mV）。

FID 与 FPD 是质量型检测器，在测定灵敏度时，分别用正十六烷-异辛烷和甲基对硫磷-无水乙醇试样，进样量为 2μl，连续进样 6 次，获得正十六烷和甲基对硫磷峰面积算术平均值，按上述公式计算出相应的灵敏度。

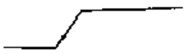
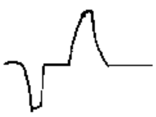
第二节　仪器的维修

仪器的仪表发生故障，可依照仪器使用说明书或线路图去查找原因，排除故障。表 10-3 列出了一些现象所显示的故障原因，以及排除的方法，供作参考。

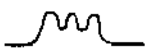
表 10-3　故障分析与排除

故障现象及图象	可能的原因	排除方法
电源不通	（1）插头接触不好 （2）电源保险丝烧断 （3）仪器的保险丝烧断	（1）检查各插头，是否插紧，进行处理 （2）更换电源的保险丝 （3）更换仪器的保险丝
进样后不出峰 	（1）记录器或检测器没有工作 （2）样品没气化 （3）色谱柱断裂，管道漏气 （4）注射器堵塞和漏气	（1）检查记录器及信号线有无问题，检测器有无信号输出 （2）升高气化温度 （3）排除漏气 （4）修理和更换进样器
色谱柱出口无气体或气体流小	（1）色谱柱断了 （2）载气分流过大 （3）隔热垫漏气	从色谱柱出口向入口逐段试漏，找出漏气部位，进行处理
色谱箱、检测器、气化室不升温	（1）未通电或电热丝烧断 （2）温控的元件有故障	（1）检查电源检修电热丝 （2）更换损坏的部件
点不着火	（1）喷嘴堵塞 （2）点火装置有故障 （3）进入检测器的燃烧气与助燃气的比例不当 （4）氢气管路漏气	（1）排除堵塞物或更换喷嘴 （2）修理点火装置 （3）点火时氢气流量应大些 （4）排除漏气现象
基线不能调零	（1）基流太大 （2）记录器零位调节器位置定的不对，联接不正确或其他故障 （3）检测器或放大器有故障	（1）排出造成基流大的原因（如气体不纯、固定液流失、燃烧气量过大） （2）检查补偿电压是否不足，调零电位器是否失灵 （3）检查检测器与放大器的参数是否正常
基线出现小毛刺 	（1）电源受干扰 （2）接地不良 （3）记录器滑线有污垢 （4）载气管路中有凝聚物起泡	（1）排除有干扰的用电设备 （2）不能用零线代替地线 （3）清擦滑线电阻 （4）加热管路吹去柱出口管道中凝聚物

续表

故障现象及图象	可能的原因	排除方法
基线抖动 	(1) 放大器或记录器的灵敏度过高 (2) TCD 电桥的电流过高 (3) FID 的燃烧气量过大 (4) 转子流量计脏，造成气流有脉冲	(1) 适当降低放大器或记录器的灵敏度 (2) 减小电流量 (3) 减少燃烧气量 (4) 更换转子流量计
基线波动 	(1) 炉温控制不当 (2) 载气控制不良 (3) TCD 电桥的电流不稳 (4) 使用氢气发生器时氢气波动过大	采取相应措施
基线飘移 	(1) 系统未稳定或漏气 (2) 载气逐渐用完 (3) 放大器失灵 (4) TCD 元件失灵 (5) 固定液受热流失	(1) 温度达到平衡后 (2) 更换气瓶 (3) 检修放大器 (4) 更换 (5) 降低柱温
基线有死区 	记录器的死区太大	调整记录的阻尼
峰前出现负的尖端 	(1) 进样量过大 (2) 检测器被污染 (3) 有漏气	(1) 减少进样量 (2) 清洗检测器 (3) 排除漏气
峰尾出现负的尖端 	(1) 检测器超负荷或被污染	清洗检测器
出现反峰 	(1) 放射源被污染 (2) 记录器输入线接反 (3) 载气不纯 (4) 用热导检测器时使用氮气作载气	(1) 清洗或更换放射源 (2) 改正电源接线 (3) 更换载气 (4) 改用氢气作载气
出峰后基线下降	(1) 进样量过大 (2) 燃烧气减少	(1) 减少进样量 (2) 增加燃烧气
前伸峰形状 	(1) 进样量过大 (2) 柱温过低 (3) 进样技术欠佳 (4) 色谱柱不良	(1) 减少进样量、增加固液含量、增加载气流速 (2) 提高柱温 (3) 改进进样技术 (4) 更换色谱柱

续表

故障现象及图象	可能的原因	排除方法
曳尾峰形状 	(1) 系统死体积大 (2) 柱温偏高 (3) 进样技术欠佳 (4) 用非极性柱分析样品组分	(1) 改进气流系统、减小死体积 (2) 适当降低柱温 (3) 提高进样技术 (4) 改用极性柱
平头峰形 	(1) 超过记录器测量范围 (2) 离子化检测器所用的静电计输入达到饱合 (3) 记录器滑线电阻或机械部分有故障	(1) 改变记录器量程或减少进样量 (2) 减少进样量、适当调节衰减 (3) 可按说明书修理
圆头峰形 	(1) 进样量过大，超过检测器线性范围 (2) 记录器灵敏度过低 (3) 放射源 ECD 被污染	(1) 减少进样量 (2) 适当调节记录器灵敏度 (3) 按要求清洗
峰形不平滑 	(1) 放大器或记录器的灵敏度过高 (2) 气流不稳使火焰跳动（FID） (3) 燃烧气与助燃气比例不当	(1) 适当降低放大器或记录器的灵敏度 (2) 调整气体流速 (3) 调整气体流量的比例
基线呈台阶状 	(1) 气流管路中有障碍物，使气流周期性地脉动 (2) 直流电器的开关信号造成的影响	(1) 清除障碍物 (2) 用屏蔽线将其隔开
峰分不开 	(1) 柱温过高 (2) 柱长不够 (3) 固定液已流失过多 (4) 固定液或载体选择不当 (5) 载气流速太高	(1) 降低柱温 (2) 增加柱长 (3) 更换色谱柱 (4) 另选固定相做色谱柱 (5) 降低流速
FID 灵敏度逐渐降低	由于流失的聚硅氧烷固定相在 FID 燃烧造成白色 SiO_2 于收集极	清洗喷嘴
ECD 灵敏度逐渐降低	(1) 放射源受到污染 (2) 放射源逸失	(1) 使用纯化的载气，勿使污染物进入检测器 (2) 检测器使用温度不可太高
保留值正常、峰面积变小	(1) 进入进样器的样品量小 (2) 放大器，记录器衰减过大	(1) 排除漏气 (2) 调节衰减
保留时间延长，峰面积变小	(1) 柱温变低 (2) 载气流速变慢 (3) 漏气	(1) 增加柱温 (2) 调整载气流速 (3) 克服漏气
程序升温时基线飘移	(1) 色谱柱未老化 (2) 载气流速不平衡 (3) 柱子被沾污	(1) 进行色谱柱老化 (2) 调节两根柱子流速使之平衡 (3) 重新老化或更换色谱柱

续表

故障现象及图象	可能的原因	排除方法
保留值不重复	(1) 进样技术不佳 (2) 漏气、特别有微漏 (3) 载气流速控制不好 (4) 柱温未达平衡 (5) 柱温控制不好 (6) 程序升温中，升温重复性欠佳 (7) 程序升温过程中，流速变化较大 (8) 进样量太大 (9) 柱温过高，超过了固定液的上限或太靠近温度下限 (10) 色谱柱破损	(1) 提高进样技术 (2) 进样口橡皮垫要经常换，特别是在高温情况下 (3) 增加柱入口处压力 (4) 柱温升至工作温度后还应有一段时间平衡 (5) 检查炉子封闭情况 (6) 每次重新升温时，应用足够的等待时间，使起始温度保持一致 (7) 在使用温度上限处测流速两间的差值不得超过 $2ml \cdot s^{-1}$ (8) 减少进样量或适当溶剂将样品稀释 (9) 重新调节柱温 (10) 更换色谱柱

参 考 文 献

1 李浩春，卢佩章. 气相色谱法. 北京：科学出版社，1993

2 国家技术监督局. 气相色谱仪检定规程：中华人民共和国国家计量检定规程，JJG700－90. 1990年

3 中国科学院化学研究所色谱组. 气相色谱手册. 北京：科学出版社，1977

4 顾惠祥，阎宝石. 气相色谱实用手册. 第二版. 北京：化学工业出版社，1990

5 Dimbat M，Porter P E，Stross F H. Anal Chem，1956；28：290

（罗春荣）

第十一章 辅助技术

第一节 进样技术

气相色谱进样技术是一个颇复杂和费思考的事，因为涉及的因素很多。表 11-1 列出了一些最常见的因素，可知只是将其部分作排列组合，就令人实在无法说清楚和评价优劣，只好择而言之如后。

表 11-1 部分进样技术及要求

<table>
<tr><th>样品</th><th colspan="2">进样设备</th><th colspan="2">气化室情况</th><th colspan="2">载气情况</th></tr>
<tr><td rowspan="5">气体</td><td rowspan="2">注射器</td><td>手动</td><td rowspan="6">气体或液体样品被送入气化室空间</td><td rowspan="3">气化室已加热，进样后保持恒温</td><td rowspan="3">分流</td><td rowspan="3">经典的</td></tr>
<tr><td>自动</td></tr>
<tr><td rowspan="2">进样阀</td><td>手动</td></tr>
<tr><td>自动</td><td rowspan="3">气化室为低温，进样后程序升温</td><td rowspan="3">不分流</td><td rowspan="2">Grob 式的</td></tr>
<tr><td>气体量管</td><td>手动</td></tr>
<tr><td rowspan="4">液体</td><td rowspan="2">注射器</td><td>手动</td><td>经典的</td></tr>
<tr><td>自动</td><td rowspan="5">液体样品被直接送入色谱柱头</td><td rowspan="3">气化室已加热，进样后保持恒温</td><td rowspan="5">不分流</td><td rowspan="5">经典的</td></tr>
<tr><td rowspan="2">进样阀</td><td>手动</td></tr>
<tr><td>自动</td></tr>
<tr><td rowspan="2">固体</td><td>裂解器</td><td>自动</td><td rowspan="2">气化室为低温，进样后程序升温</td></tr>
<tr><td colspan="2">将样品用溶剂溶解成液体，然后按液体样品处理</td></tr>
</table>

一、进样方法

就气相色谱样品的状态而言，气体、液体和固体都有。气体和液体样品可用不同规格的注射器、进样阀以手动或自动方式进样。气体样品还可用气体量管进样。注射器和气体量管进样的优点是进样量可以改变，操作简便；缺点是若非自动进样则进样量难以达到重复定量。图 11-1 是气体量管进样装置。进样前将样品从贮气瓶取入量管中，关闭活塞 3，记下量管中样品读数，然后旋转活塞 3，用下口瓶把样品气压入色谱柱，关闭活塞 3，记下此时量管中样品读数，其差值是进样量。

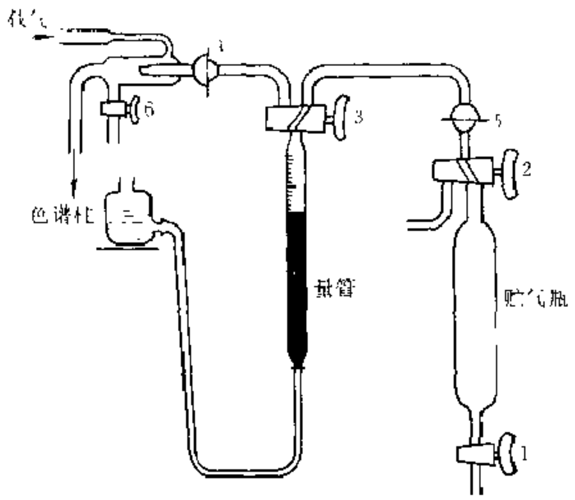


图 11-1 量管进样装置

用进样阀可获得重复性颇好的定量结果。气体样品可用四通或六通阀手动方式定体积进样。图 11-2 是用两个四通阀进样

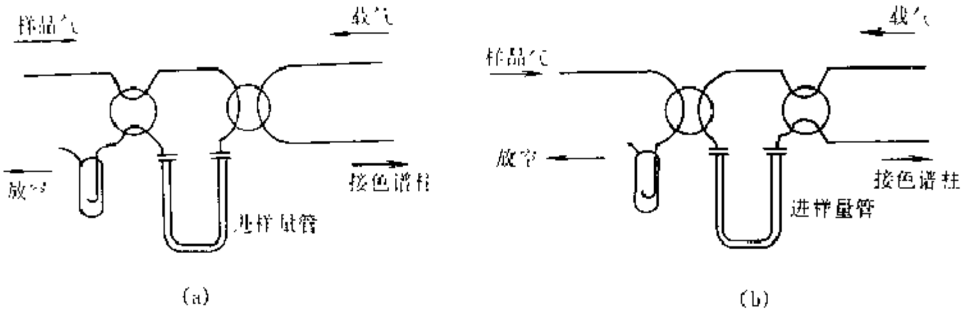


图 11-2 四通活塞定体积进样示意图
(a) 取样位置；(b) 进样位置

示意图，进样量管依样品量大小而定。图 (a) 为取样位置，此时用样品气置换量管中的载气，使量管完全充满样品气。图 (b) 为进样位置，此时载气将样品气带入色谱柱中。图 11-3 是用一个六通阀进样的示意图。实线为取样位置，虚线为进样位置。用进样阀的缺点是在置换量管时消耗样品气较多，进样系统耐压较差。

自动的进样阀颇多，如流程色谱仪有气动膜式六通阀、六通平面阀、六通滑杆阀等用于在线周期性、定量取气体样品。有短管阀、旋转阀、滑杆阀等取液体样品。图 11-4 是能自动定量进样的滑杆阀示意图，当压缩空气进入气室 1 时，将滑杆右推，完成进样操作；当压缩空气进入气室 2 时（同时将气室 1 内的气体放空），使滑杆推向左边进行取样操作。滑杆阀进样重复性良好，最小进样量为 1μl。图 11-4 为滑杆阀示意图。

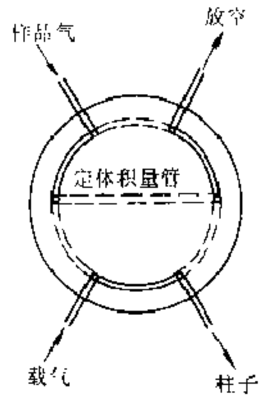


图 11-3 六通活塞进样示意图

固体样品进样则是用裂解器将样品裂解和进样的，或者将样品溶入溶剂中，然后如同液体样品那样进样。

液体和固体样品还可按顶空分析法进样。

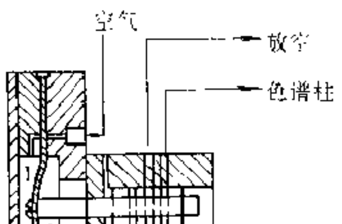


图 11-4 滑杆阀示意图

二、气化方式

样品必须先完全气化，然后在气相色谱柱中进行组分分离。当进样装置把样品送入气化室的空间或气化室内色谱柱的顶端（柱头进样），此时气化室可能是已加热至高温并保持恒温；也可能是低温，样品进入后才快速程序升温。一般地说，样品进入气化室空间之际，气化室多已加温至可完全气化样品的温度，而样品进入气化室内柱头之时，气化室多是在此时才程序升温，使样品开始气化。例如由schomburg[1]和Grob[2,3]提出的冷柱头进样，它是一种把样品直接送到柱子顶端而无隔膜、无分离（属直接进样）和无样品瞬间激烈蒸发过程的“冷”进样系统，对宽沸程和热不稳定化合物均可得到极好的定性和定量结果。

三、载气分流

样品进样量若较大，则需要减少其进入色谱柱的量，以免超过色谱柱负荷。可采取的办法是只容许带有气化样品的载气一部分进入色谱柱，而将另一部分放空，即将载气（样品）进行分流。当然，如果用的是填充柱和大口径空心柱，样品量不会超过其负荷，就无需分流了。

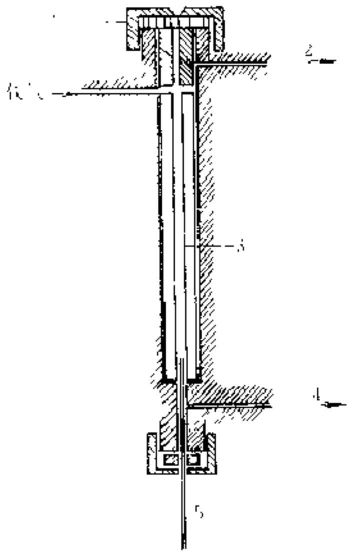


图 11-5 分流/不分流进样器

1—进样隔膜；2—隔膜清洗气针形阀；3—玻璃或石英内衬管；4—分流放空针形阀；5—玻璃毛细管柱

（一）分流进样法

由 Desty 最早提出[4]，分流装置大多为如图 11-5 所示。现在一般都设计为分流/不分流两用形式。关闭放空阀，就变成不分流进样方式。

载气引入气化室上端后，一小部分用于隔膜清洗，大部分进入气化室的样品则由微量注射器穿过隔膜注入气化室。气化室内装有一玻璃或石英内衬，衬管中填充石英或玻璃毛，使样品的蒸气和载气充分混合。此混合气在进柱前，大部分通过放空阀放空，极少部分进入色谱柱，进入的样品量可按一定的分流比来调节。分流比大都在1∶10～1∶500 的范围内调节。对柱长度 25m，内径<0.3mm、液膜<1.0μm 的柱子，常用分流比为 1∶30～1∶120。

一个性能好的分流进样器应满足的基本要求是：在分流进样器内样品扩展小；样品中各组分成线性分流，即样品中每一组分都能准确地按其原有比例分流，结果重复性好。

对于一些沸程宽、浓度差别大、化学性质各异的混合样品在分流进样中，由于非线性分流导致定量失真，解决方式有 Bayer 等[5]提出的停流-分流进样法；Schomburg 等[6]提出的柱头进样与分流相结合的预柱分流技术；Grob[7]提出的液相分流进样方法；以及 Schomburg[8]提出的“冷却针头”（CNS）分流进样技术，可供参考。

（二）Grob 不分流进样法[9,10]

Grob 不分流进样主要是基于在进样时暂时关闭分流阀，使大量溶剂在柱头冷凝，对溶质起到捕集效应（称溶剂效应），加上进样后用干净载气流吹洗气化器等特点，以实现稀溶液的全样品直接进样。

柱温、溶剂种类和进样量是制约溶剂效应的重要因素，柱温的选定须依据分析样品、溶剂沸点和固定液性质。表 11-2 列出了几种常用溶剂最佳使用的起始柱温，一般要求进样时柱温至少要比溶剂沸点低 20℃，否则将会影响最先流出的色谱峰。进样量一般在（0.5～3）μl。

不分流进样气化室温度一般在（200～220）℃，用 H_2 作载气在缓慢进样中（>30s），分流阀被关闭，约待 30～90s，确保大约 90%～95%样品进入柱子后再

表 11-2 部分溶剂使用的起始柱温

溶剂	沸点/℃	建议使用的起始柱温/℃
二氯甲烷	40	10～30
氯仿	61	25～50
二硫化碳	46	10～35
乙醚	35	10～25
戊烷	36	10～25
己烷	69	40～60
异辛烷	99	70～90

打开分流阀，让最后一部分样品气放空，以消除溶剂峰的拖尾干扰。放空阀的开启时间必须合理掌握，太早或太晚都会影响定量结果和峰形。对于大多数系统，在相当于气化室体积2倍的载气体积扫过气化室后放空，可得满意结果。

四、进样操作要领

把样品注入色谱柱中后，样品以什么方式流动？一种模型是“塞子流动”，即把样品蒸气看成像一个塞子一样在柱中流动。它被载气送到色谱柱中，进行分配平衡，溶质的浓度在第一块塔板上最高。这是一种理想的情况，另一种流动模型是“指数流动”。塞子流动是以恒定的浓度 C_0 注入体积 V_S 的样品，而指数流动则以 $C=C_0\exp(-V/V_s)$ 进入色谱柱的，即当载气进入色谱柱的体积 $V=4V_S$ 时，样品近于完全进入色谱柱子（98%）。上述两种进样方式，不可超过最大进样量（又称样品容量或柱容量）。每根色谱柱都因固定液总量不同而具有不同柱容量。进样量应选择在组分量与其峰高或峰面积成线性关系的范围内。进样量过大会导致：(1) 降低柱效率和分离度；(2) 超过柱负荷，使峰高不呈线性增加，不能用峰高定量；(3) 超过检测器的线性范围，峰高峰面积都不呈线性增加。填充柱一般进液样不超过10μl，气样不超过10ml，并取决于检测器的灵敏度。热导检测器一般（1～5）μl，氢焰检测器1μl以下，空心柱最大允许进样 2.3×10^{-4}g。

进样量除对柱效有影响外，对保留时间也有一定影响，影响的程度受样品性质和柱温的制约。

在进样量一定的情况下，希望样品在进入柱中所占据理论板数越少越好，特别是对分配比较小的组分，要求进样时间越快越好，否则会降低柱效，进样时间愈长，峰宽增加愈厉害。

对定量分析来说，不仅要求进样快，而且要求每次进样要一致，以保证定量分析的精密度。

一般说来，进针速度稍快为好（高沸点物质进针速度可慢些），针头不要靠管壁，低沸点样品拔针要快。

五、特殊情况的样品采集和进样

（一）带压液化 C_4、C_5 烃类的采样装置

有带取样瓶和带取样管两种。前者取样瓶是一个小的玻璃瓶，可耐压（0.15～0.2）MPa。取样的关键是既不要让轻组分偏低，也不要让重组分偏高，因此要求操作敏捷。取样后，样品放在冰盐水浴中保存。分析时用预先被干冰冷却的注射器抽取样品，迅速注入色谱仪。后者取样管是体积约（2～3）ml的耐压管，取样时，将管直接接到取样点的管路上，取样后移接到气化装置上，使其全部气化，令气体样品注入色谱仪。

（二）密封或氮气保护取样注射器

玻璃注射器的尾部气密性较差，当所取样品不能与空气接触时，可在注射器尾部加密封垫，为增加密封性，注射杆上端可稍涂真空润滑油。

当测定溶剂油中溶解氧时，取样的微量注射器尾部要用氮气保护。

（三）C_4～C_5 烃类混合气样的进样

C_4～C_5 烃类混合气样最好用六通阀进样。因为注射器的进样速度快，样品在瞬间可能达到露点，使得部分组分液化留在注射器内壁上，影响进样的准确性，而六通阀进样则不存在这一问题。用注射器进标样进行定量分析时，标样须用空气或氮气配制，不要用烃类配制，否

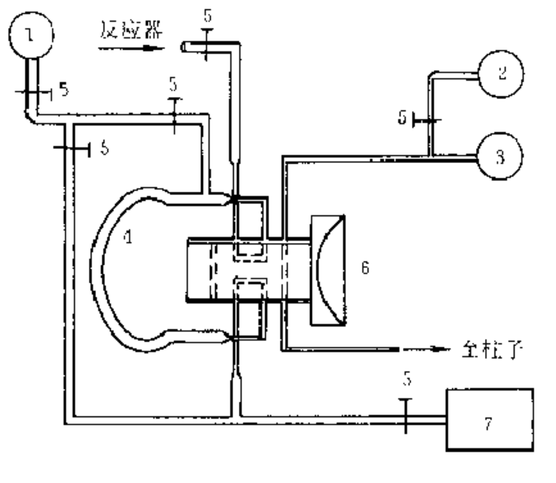


图 11-6 负压系统取气样装置

1—绝对压力表；2—压力调节器；3—流速控制器；4—取样管（100ml）；5—阀门；6—六通阀；7—真空泵

则会产生较大误差。

（四）负压系统取气样装置

从负压系统取气样，一般取样量要大，不然转变为常压时样品量太少。要尽量缩短进样时间，以免不稳定的反应产物发生变化。负压取气样的装置可参看图 11-6。

取样前先将取样系统抽真空，与反应器真空度相同。打开阀 V_2，V_3，V_5，V_6，关闭阀 V_1 及 V_4，使样气连续通过取样管 L，压力表读数稳定后便可进样。进样前关闭 V_3，打开 V_1，由压缩空气推六通阀滑杆至右侧，由压力调节器 R 送入高速氮气，迅速将样品压至柱前细管内。六通阀动作后，V_1 关闭，用 FC 控制载气流速进行色谱分析。关闭 V_6，30s 后六通阀退回原位。系统再次抽空后，准备下次进样。

第二节 柱切换技术

在实际分析工作中，用一根色谱柱分离样品时可能遇到这样的困难：组分不可逆吸附或流出时间太长；部分组分彼此分离不佳或难以定性；痕量组分被溶剂或主组分干扰等。此时若使用柱切换技术，这些困难常可迎刃而解。

柱切换技术是将两根（或多根）色谱柱与检测器、冷阱等部件组合起来进行样品分析的一种技术，可以用阀件或压力管进行柱的切换。现分别从柱切换功能和系统两个方面简述如下：

一、柱切换功能

从柱切换的功能而言，主要为切割与反吹，可使载气按不同的流路方向，将组分送入或排出色谱柱。

（1）切割功能：样品通过色谱柱 1 时，大部分组分流出后直接进入检测器，小部分组分却是进入色谱柱 2，继续分离，然后进入检测器。由于柱 1 和柱 2 选择性的不同或柱效的增加，使这小部分组分可以分离得更好些，有利于组分定性。

（2）反吹功能：当样品中轻组分已流出色谱柱，被测定或进入另一色谱柱，可将载气改为从其出口端进入柱中，使柱中重要组分被反吹排出，如此可节省分析时间，或不使上述另一色谱柱受这些重组分污染（可以看出，进行组分切割时，有可能同时进行反吹）。

二、柱切换系统

柱切换系统有用阀切换与用压力管切换的不同，还有色谱柱排列方式不同等，多种多样

（一）平面阀切换系统

1. 单柱正逆向冲洗

如图 11-7 所示，载气通过色谱柱作正逆向冲洗，以免重组分正向通过色谱柱（在扭转平面阀后重组分被载气逆向吹出色谱柱），可节省分析时间。其中的四通阀也可改用六通阀。

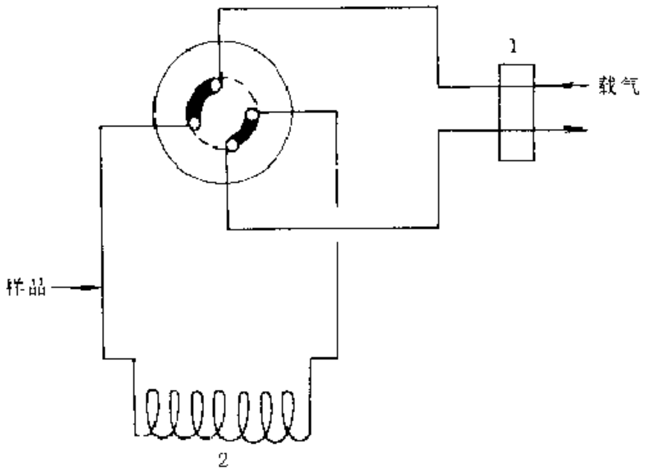


图 11-7 单柱正逆冲洗（用四通阀）
1—检测器；2—色谱柱

2. 双柱并联切换

需分别用两根色谱柱才能解决问题时，可采用图 11-8 所示的排列方法。这样排列时，载气通过两根色谱柱的压力必须相等，才可避免切换时载气流速的突然改变。也可用逆向冲洗来达到此目的，如图 11-9 所示。其优点是切换时载气流速不会发生突然变化，缺点是色谱柱与检测器间的死体积过大。

图 11-7 单柱正逆冲洗（六通阀）

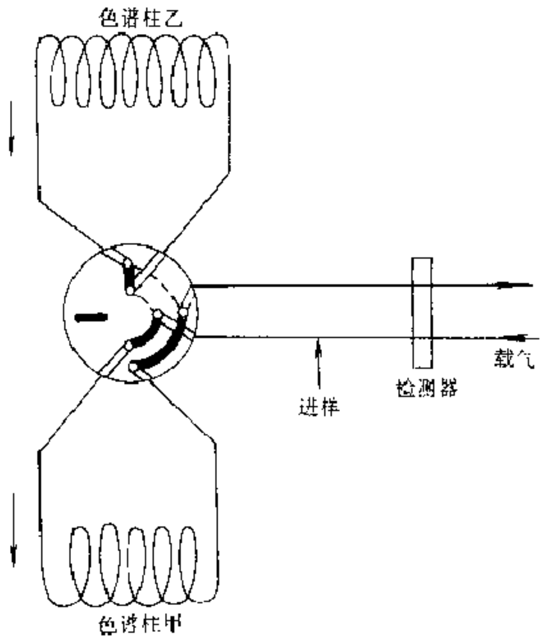


图 11-8 双柱并联切换使用（一）

3. 双柱串联切换

如图 11-10 所示，这种排列可收到单柱正逆冲洗及双柱并联使用的效果。既可缩短分析时间、又可解决两色谱柱对某些组分彼此不能分离的问题。

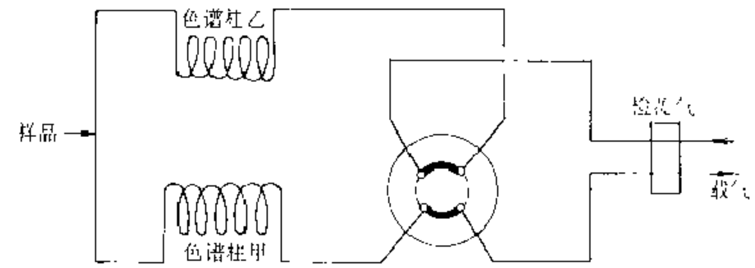


图 11-9　双柱并联切换使用（二）

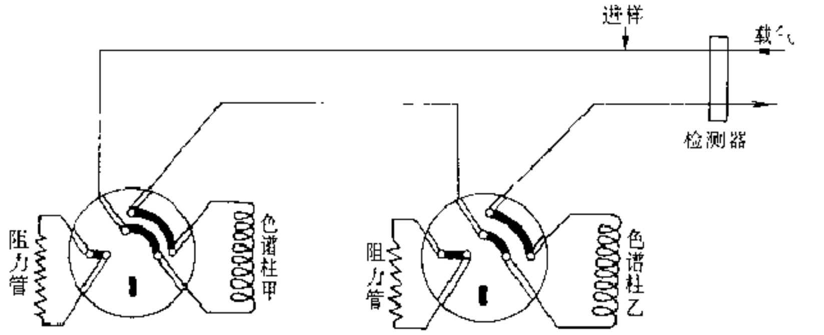


图 11-10　双柱串联或切换使用

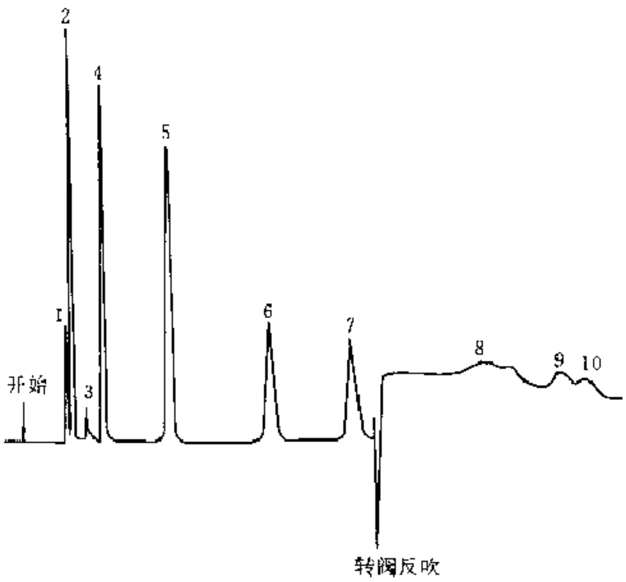


图 11-11　单柱正逆向冲洗分析天然气

色谱峰：1—N_2；2—甲烷；3—CO_2；4—乙烷；5—丙烷；6—异丁烷；7—正丁烷；8—C_6烃等重烃；9—正戊烷；10—异戊烷

色谱柱：30% DC—200，Chromosorb P AW（60 目～80 目），0.76m ×3mm

柱　温：40℃

（二）压力管柱切换系统

平面阀虽然使用方便，但一般不能在温度和压力过高的情况下使用，否则阀体会漏气。可采用压力管柱切换解决这一问题。这是因为控制压力管压力差的电磁开关都在色谱炉外面，处于室温下，且电磁开关阀能承受较高的压力。压力管虽起阀的作用，但本身不是阀，所以又被称作无阀切换。

现举几个例子对切换技术作说明：

图 11-11 是用单柱正逆向冲洗分析天然气的例子。当组分 1～7 流出色谱柱后，转动平面阀进行反吹，将组分 8～10 逆向排出色谱柱。若反吹的载气流速甚大，则后者会成为一个未分开的色谱峰。

图 11-12 是用中心切割分析柠檬油中抗氧化物的例子。两根空心柱分别置于两个色谱炉中，样品通过柱 1

进行分离的过程中，将感兴趣的组分切割入柱 2，待样品全部通过柱 1 后，再转动切换阀通载气入柱 2，分离切割其中的组分，于是得到抗氧化物 BHT 与 BHA 色谱峰。

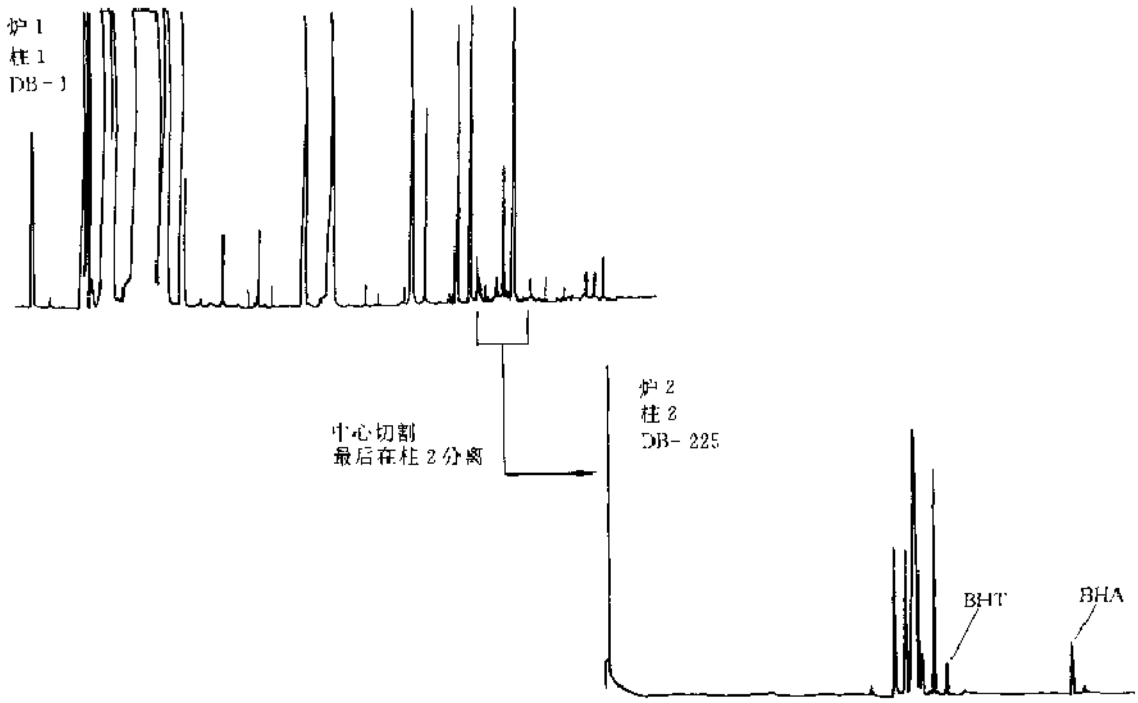


图 11-12 双炉双柱中心切割分析柠檬油中抗氧化物

色谱炉	炉 1	炉 2
色谱柱	柱 1 DB-1，30m×0.32mm，d_f=0.25μm	柱 2 DB-225，30m×0.32mm，d_f=0.25μm
柱温	85℃—→110℃，2℃·min^{-1}	中心切割时 30℃，分析时 70℃—→220℃，10℃·min^{-1}

顺便指出，若中心切割时不是将感兴趣的组分切割入柱 2，而是进入冷阱富集，在多次富集后气化冷阱中富集物，通载气将其送入柱 2 进行分离，这种中心切割与冷阱富集法更具有众多优点。如①特别有利于痕量组分分析，因为可多次进样（允许超柱负荷）和多次切割，增加了冷阱中痕量组分的绝对量，有利于检测和定量。②冷阱富集消除了被切割组分通过柱 1 形成的峰扩张；富集物气化等于再次进样，可更准确地得到痕量组分在柱 2 的保留值，有利于其定性。③不必一定要用两个色谱炉，有可能将两色谱柱都放置在一个色谱炉内，从而解决无双色谱炉的困难。

第三节 化学衍生法

一、化学衍生法的目的

在气相色谱中，把欲分析的化合物用化学反应的方法转化为另一种化合物称为衍生物的制备。

应用化学衍生法的目的有以下几点：

①有些化合物由于挥发性过高或过低，极性甚强或稳定性差等原因，不能直接进样分析，

经过衍生化反应后就可方便地进行气相色谱分析。

②一些难分离的组分，将其转变为衍生物后易于分离，有利于更准确定性。同时一些化合物经过衍生后，能获得较对称的色谱峰。

③有些化合物制备成衍生物后，用选择性检测器检测，可提高该化合物的最低检测量。另外，有些化合物的吸附等温线是非线性的，而其衍生物的吸附等温线是线性的，衍生物有利于定性、定量。

④样品中的有些杂质因不能成为衍生物而被除去，可改进分离效果。

二、化学衍生方法

组分分子中有一个或几个羟基、巯基、氨基、亚氨基、羧基和羰基等极性基团，就会使分子间和分子内的相互作用增强，挥发性降低，给气相色谱分析带来困难。除羰基以外，以上基团都有形成氢键的强烈倾向，针对这些基团中的活泼氢进行衍生反应，其结果就可满足色谱分析的需要；所选取的化学衍生方法应具有以下特点：

①反应容易重复，操作简单。

②反应能定量进行，可满足定量分析的要求。

③衍生物易纯化。

④衍生产物宜于色谱分离和检测。

⑤衍生试剂价廉易得。

一般的衍生化方法有酰化、酯化、烷基化等反应。

（一）酰化反应

组分为含有胺基、羟基、巯基的胺类和酚类，其活泼氢可被酰基取代，生成极性低挥发高的衍生物。此法又可分为酸酐法和卤代酰基法。

1．酸酐法

此法是用含有酸酐的吡啶或四氢呋喃制成酰化的衍生物。

$$\begin{matrix} RNH_2 & & RNCOR' \\ ROH & \xrightarrow{(R'\cdot CO)_2O} & ROCOR' \\ RSH & & RSCOR' \end{matrix}$$

若酰化试剂是乙酸酐或苯甲酸酐，加乙醚可减缓反应速度。

2．卤代酰基法

酰化试剂有乙酰氯、苯甲酰氯、三氟乙酰酐、五氟丙酰酐、三氟乙酰咪唑、七氟丁酰咪唑等。衍生化后的组分有利于使用电子捕获检测器。

（二）酯化反应

酯化反应特别有利于制备羧基的衍生物。其方法有重氮烷烃法、卤化硼催化法、氢氧化铵盐分解法和无机酸催化法。

1．重氮烷烃法

$$RCOOH+CH_2N_2 \longrightarrow RCOOCH_3+N_2$$

重氮甲烷可用浓碱将 *N*-甲基-*N*-亚氨基脲或 *N*-甲基-*N*-亚硝基对甲苯磺酰胺分解而得。反应简单、快速、产率高、一般没有副产物，须注意重氮甲烷毒性大，活性高，易分解甚至爆炸，应在使用前临时制备，并只能在－20℃以下短时间保存。

2．甲酯法

(1) 卤化硼催化法

$$RCOOH+CH_3OH \xrightarrow{BF_3} RCOOCH_3+H_2O$$

此法可使某些有立体障碍的羧基反应。如反应条件剧烈，常会伴随副反应。

(2) HCl 或 H_2SO_4 催化

$$RCOOH+CH_3OH \xrightarrow{HCl\ 或\ H_2SO_4} RCOOCH_3+H_2O$$

此法可将短链羧酸与甲醇反应，缺点是可能有副反应。

(3) 氢氧化铵盐分解法

$$R—COOH+(CH_3)_4NOH \longrightarrow R—COON(CH_3)_4+H_2O$$

$$R—COON(CH_3)_4 \xrightarrow{\triangle} R—COOCH_3+(CH_3)_3N$$

用酚酞作指示剂，先将组分与四甲基氢氧化胺的甲醇溶液进行中和反应，再将反应液注入 360℃或 400℃的气化室，分解生成有机酸甲酯。

(三) 硅烷化法

组分中的活泼氢被烷基--硅基取代后，可生成极性低、挥发性高和热稳定性好的硅烷基化合物。

$$
\left.\begin{array}{l}—OH\\—COOH\\—SH\\—NH_2\\=NH\end{array}\right. \quad +TMS\ 给予体 \longrightarrow \quad \begin{array}{l}—O—Si(CH_3)_3\\—COO—Si(CH_3)_3\\—S—Si(CH_3)_3\\—NH—Si(CH_3)_3\ 或—N—[Si(CH_3)_3]_2\\=N—Si(CH_3)_3\end{array}
$$

硅烷化通常指三甲基硅烷化，此法可使多个功能基在一步反应内全部衍生，衍生物有较大的挥发性，还可产生容易辨别的碎片离子，是色质-谱联用较理想的衍生物。但此反应常常不能定量完成，产物的色谱性能也不太理想，如出现不对称峰，燃烧产物沉积在检测器上等。

一些常用的硅烷化试剂的性质列于表 11-3。吡啶、乙腈和二甲基甲酰胺是常用的溶剂，硅烷化产物对潮气较敏感，原则上要保持反应体系干燥。对只含微量水的样品，多数情况下可通过加入过量硅烷化试剂除水。

表 11-3 常用硅烷化试剂

试剂名称	缩写	结构式	沸点/℃	d_4^{20}	n_D^{20}	注
三甲基氯硅烷	TMCS	$(CH_3)_3Si—Cl$	56~57	0.857	1.388	很少单独使用，多用于增加硅烷化能力
六甲基二硅氨烷	HMDS	$(CH_3)_3Si—NH—Si(CH_3)_3$	124~127	0.774	1.408	多与 TMCS 混用于醇、酚
六甲基二硅氧烷	HMDSO	$(CH_3)_3Si—O—Si(CH_3)_3$	99~101	0.759	1.377	用于醇类
N-三甲基甲硅烷二乙基胺	TMSDEA	$(CH_3)_3Si—N(C_2H_5)_2$	127~129	0.767	1.412	用于氨基酸、胺类、酰胺、醇
1-三甲基甲硅烷咪唑	TSIM	咪唑环 N—Si(CH3)3（N=CH—N—CH=CH）	90~92	0.957	1.476	用于羟基
N-甲基-*N*-三甲基甲硅烷乙酰胺	MSA	$CH_3—CO—N(CH_3)—Si(CH_3)_3$	159~161	0.904	1.438	用于碳水化合物、胺类、氨基酸

续表

试剂名称	缩写	结构式	沸点/℃	d_4^{20}	n_D^{20}	注
N,O-双三甲基甲硅烷乙酰胺	BSA	$CH_3-C(=N-Si(CH_3)_3)-O-Si(CH_3)_3$	p_{35} 71～73	0.832	1.418	通用试剂，常加1%TMCS
N-甲基-N-三甲基甲硅烷三氟乙酰胺	MSTFA	$CF_3-CO-N(CH_3)-Si(CH_3)_3$	130～132	1.074	1.380	与BSTFA相同
N,O-双三甲基甲硅烷三氟乙酰胺	BSTFA	$CF_3-C(=N-Si(CH_3)_3)-O-Si(CH_3)_3$	p_{12} 47	0.974	1.385	副产品比用BSA的副产品易于挥发，常加1%TMCS
氯甲基二甲基氯硅烷	CMDMCS	$Cl-CH_2-(CH_3)_2Si-Cl$	110～113	1.081	1.437	用于甾族、碳水化合物、酚酸

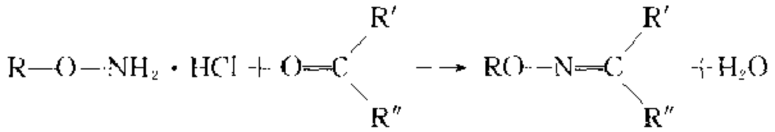
注 压力为101325kPa条件下的沸点温度，但其中 p_{35} 与 p_{12} 的单位为mmHg，1mmHg＝133.3Pa。

硅烷化反应也可在色谱柱上进行，方法是将样品注入柱内，随后注入硅烷化试剂，让两者在色谱柱内相遇，柱内较高温度对反应有利。所形成的衍生物立即得到分离，这对分析不稳定的硅烷化衍生物是有益的。

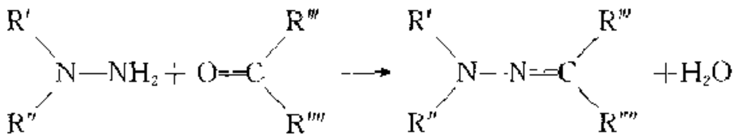
（四）肟和腙

肟和腙是分析羰基化合物中常见的衍生物。通过把羰基化合物与$RONH_2$-HCl或RR′-N-NH_2反应生成极性较低的肟和腙衍生物，提高检测灵敏度，有利于定性、定量。

肟的反应如下：



腙的反应如下：



三、衍生物的制备

制备衍生物时要特别仔细，否则会有严重的定性与定量误差。一些重要的有机化合物衍生物的制备方法见表11-4。

操作方法1：取（5～10）mg样品，加0.5ml硅烷化试剂及约1ml溶剂，溶解后或加热（10～15）min，冷却后进行硅烷化反应。

操作方法2：取100mg有机酸，加入3ml BF_3甲醇液，于近60℃下加热（5～10）min，冷却后用25ml己烷移入分液漏斗，用NaCl饱和溶液洗两次，加无水Na_2SO_4干燥。

操作方法3：向（1～2）mg样品中加入2ml干燥的苯和0.2ml TEAI，于60℃加热（15～30）min，冷却后用2ml水洗3次，以硫酸镁干燥。

操作方法4：取4ml生物组织或体液的甲苯抽提液于螺旋试管，通氮气使在60℃下挥发，加25ml TEAH（即三乙基苯基胺氢氧化物）溶解残渣，取4ml此溶液直接进样分析、气化室

温度应高于260℃。

操作方法5：取4ml伯胺、仲胺、羟基或巯基组分于1ml样品瓶中，加0.2ml MBTFA及0.5ml溶剂，于（60～100）℃下加热（15～30）min。

操作方法6：用1ml干燥的吡啶溶解（5～10）ml样品，加入0.5ml BMDMCS（即溴甲基二甲基氯硅烷），回流（2～3）h，冷却后直接分析。

操作方法7：在含10mg有机酸样品的0.5ml己烷中，加入100μl TMTFTH试剂和50μl丙酸甲酯混合液10μl，猛烈搅拌1min，取5μl水相（下层）进样分析。

操作方法8：取（1～3）mg氨基酸、生物碱或儿茶酚胺，用0.1ml乙腈溶解，加入0.2ml TSIM，盖好样品瓶在60℃下加热3h，然后加PFBC（五氟苯甲基酰基氯）0.1ml，最后在60℃加热30min。

表11-4 重要有机化合物衍生物的制备方法[30]

官能团	衍生方法	试剂	衍生物	操作方法
羧酸	硅烷化	BSTFA等	$RCOOSi(CH_3)_3$	1
	酯化	重氮甲烷，BF_3/醇等	RCOOR′	2
醇	硅烷化	BSTFA等	$R-O-Si(CH_3)_3$	1
	酰化	HFBI等	$R-O-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-PFA$	3
	酯化	TMAH等	$R-O-R'$	4
酚	硅烷化	BSTFA等	$Ar-O-Si(CH_3)_3$	1
	酰化	HFBI等	$Ar-O-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-PFA$	3
	酯化	HFBI等	$Ar-O-R'$	4
胺	硅烷化	BSTFA等	$R-N-Si(CH_3)_3$	1
	酰化	HFBI等	$R-N-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-PFA$	3
	酯化	TMAH等	$R-N-R'$	4
硫赶类	酰化	MBTFA等	$R-S-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-TFA$	5
羰基化合物	硅烷化	CMDMCS等	$(CH_3)_3Si-O-N{=}C{=}$	6
	酯化	TMTFTH等	$CH_3-O-N{=}C{=}$	7
酰胺	酰化	HFBI等	$R-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-NH-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-PFA$	3
	酯化	TMAH等	$R-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-NH-CH_3$	4
氨基酸	硅烷化	BSTFA等	$RCHCOOSi(CH_3)_3$ 下接 $N-Si(CH_3)_3$	1
	硅烷化—酰化	TSIM等	$R-CHCOOSi(CH_3)_3$ 下接 $N-TFA$	8
	酰化+酯化	TMAH等	$R-CHCOOR'$ 下接 NHR'	4

参 考 文 献

1. Schomburg G，Behlau H，Dielmann R，et al. J Chromatogr，1977；142：87
2. Grob K，Grob K，Jr. J Chromatogr，1978；151：311
3. Grob K. In Kaiser R E，ed. Proceeding of The 4th International Symposium on Capillary Chromatography. Hindelang：Hutig，1981：185
4. Desty D H，Goldup A，Whyman H F. J Inst Petrol，1959；45：287
5. Bayer E，Lin G H. J Chromatogr，1983；258：201
6. Schomburg G，Husmann H，Schulz F. HRC &CC，1982；5：565
7. Schomburg G，Hausig u. HRC &CC，1985；8：572
8. Grob K，Jr J Chromatogr，1982；237：15
9. Grob K，Jr，Romann A. J Chromatogr，1981；214：118
10. 吴采樱，曾昭睿. 现代毛细管柱气相色谱法. 武汉：武汉大学出版社，1990
11. Sandra P. Sample Introduction in Capillary Gas Chromatography. v1. Heidelberg. Huethig，1985
12. 李浩春，卢佩章. 气相色谱法. 北京：科学出版社，1993
13. 鲁益兴，陈贻文，周继红等. 衍生气相色谱及应用. 长沙：湖南大学出版社，1988
14. Drozd J. Chemical Derivatization in Gas Chromatography. New York：Elsevier，1981
15. Blau K，King G S. Handbook of Derivatives for Chromatography. London：Heyden，1977

（杨　黎）

第十二章　计算机技术

第一节　计算机在气相色谱中的应用

70年代中期，计算机技术进人色谱领域，气相色谱的发展又迈向一个新的时期，由计算机控制的全盘自动化色谱仪的出现是计算机技术在色谱领域应用最初的产物。智能色谱法的研究，则是公认的发展目标，所以现阶段计算机技术在气相色谱中的应用大致包括以下三个方面：①仪器控制和诊断；②数据采集和处理；③气相色谱专家系统。

一、仪器控制

（一）温度控制

温控是气相色谱仪中最早采用计算机技术的部分。用单片机系统配合加热控制电路可完成进样器、柱箱、检测器等多路温度的精密程序控制（图12-1）。

当前市场上先进的气相色谱仪中，将温控系统和自动开/关门控制相结合，以实现快速升、降柱箱温度，从而大大缩短了升、降温而需要等待的时间。

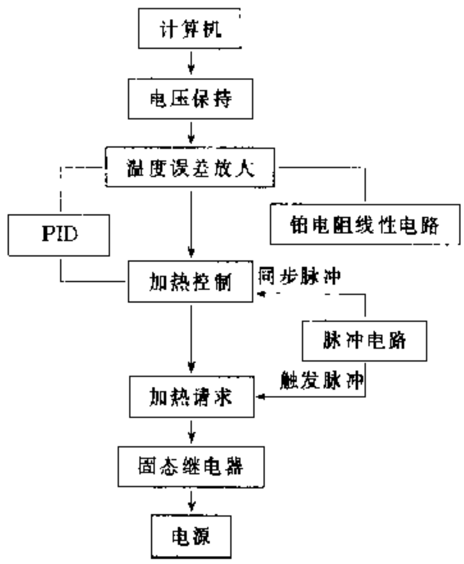


图12-1　温控系统结构

（二）流量、压力控制

为能取得精确的数据，对载气的高精度控制是必不可少的，特别是作毛细管色谱分析时，柱流量设置和分流比设置上的误差，都严重影响分析结果的准确性。计算机技术在气相色谱中这方面的应用成果，是实现了电子流量和电子压力控制技术。

Hewlett-Packard公司在其HP5890仪器上首次实现了电子压力控制（EPC）系统。该仪器采用了6路电子压力控制器对载气、进样器分流、检测器尾吹及其他辅助气路进行自动压力/流量控制，从而使仪器能方便地实现恒压、恒流、压力编程和真空补偿等四种操作模式。Hewlett-Packard公司最新推出的HP6890气相色谱仪上采用了新一代的EPC——“电子气路控制”，它除了具备HP5890色谱仪所有功能之外，还具有环境温度/压力自动补偿系统，可对HP6890多达13路气体参数（压力和流量）实行准确的数字设备和程序控制。

国外其他气相色谱仪器厂家新近推出的仪器，如岛津公司的GC-17A，Perkin-Elmer公司的Auto System XL等仪器均采用了类似的技术。GC-17A中称为先进流量控制（AFC），Auto System XL中称为程序气路控制（PPC）。在这些仪器上均能实现恒压、恒流、程序压力控制等操作模式。

电子压力/流量控制技术的实现，不仅可以提供准确、可靠、操作简便的气路参数控制，

而且还丰富了已有的气相色谱分析方法，并为实现全盘自动化的气相色谱仪器打下了良好的基础。可认为是气相色谱仪发展中的一个新的里程碑。

（三）自动进样器及其他辅助设备控制

为了获得好的精密性和重现性，同时为了批量样品的自动分析，自动进样系统越来越受到广大色谱工作者的重视。自动进样器控制流程如图 12-2 所示。

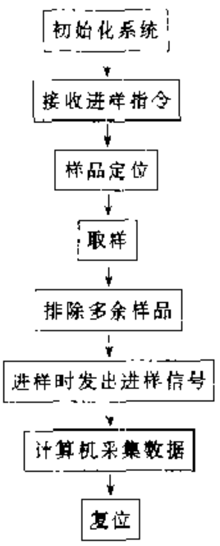


图 12-2 自动进样器控制流程

另外，目前气相色谱仪器中普遍采用的自动后开门技术、吹扫/切割技术、多柱色谱系统中的柱切换等应用中，需要采用计算机技术来实现对相关设备的精确控制。

二、数据采集和处理

色谱分析的目的是要取得混合物中所含组分的定性、定量结果，色谱数据处理装置就是要给出这些结果。最早（迄今为止仍在使用）使用的装置是记录仪，它用自动电位差计来采集检测器的输出信号，绘出色谱图，以便用手工测出色谱峰的保留值供定性使用，和测量出峰面积供定量使用。

随着电子学和计算机技术的发展，由计算机控制的自动化程度更高、功能更全面的色谱数据处理装置的出现，并不断发展、完善，它们不但可以完成色谱数据的自动采集、积分、数据变换、以及分析结果的自动判断（定性、定量）和制表打印，而且可以进行色谱仪操作的自动控制、数据存储、谱图的计算、再加工和后处理。

（一）数字化积分仪

以日本岛津公司为例，它在 70 年代末期开始推出数字化积分仪，并不断更新其产品，先后有 C-R1A、C-R1B、C-R2A、C-R2AX 到 1984 年为 C-R3A，1986 年为 C-R4A，1987 年为 C-R5A，1989 年为 C-R6A，1992 年推出的 C-R7A，其中 C-R3A 除了具备前期 G-R1A 至 C-R2AX 等产品的快速模拟记录、峰面积测定、组分定性定量计算等有关色谱分析的全部数据处理，以及将色谱图和定量报告同时打印出来等基本功能外，还装备了大容量波形存储器（176K 字节）以存储和提取色谱信号，通过改变波形处理参数就可以对一张色谱图进行多次再分析处理，而且从 C-R3A 开始，积分仪开始具备通用计算机所具备的某些功能，如采用软磁盘来保存和拷贝色谱图和分析数据，用荧光屏来显示数据，用文件号的方式存储不同分析的操作参数（这样，在进行同类型分析时，只需调出文件号，不必重新设定，即便切断电源，分析用参数也能得到保存）；可使用计算机 Basic 语言自行编写程序；可以与其他计算机进行数据通讯等。并且从 C-R4A 开始具有双通道功能，可同时连接两台色谱仪，在荧光屏上对色谱图进行再处理，同时可进行 10 张色谱图的比较。发展到 C-R7A，实际上已成为一台装备齐全的专用计算机，它配有独立的操作系统、4 兆内存、120 兆硬盘、一个软盘驱动器、一个液晶显示器、一台专用打印机、配以专用 Basic 语言编辑器，用户可自行设置、改变基线和积分参数。程序升温基线漂移时，它可以把空白基线记录存储下来，并在进行实际样品分析时自动进行基线扣除。除岛津公司外，其他仪器厂家如 Hewlett-Packard 公司、Varian 公司均有自己设计生产的积分仪销售。国内很多单位，包括仪器厂，专门研究机构和大专院校也在研制和开发类似的产品，如上海计算机技术研究所生产的 CDMC-1 和 CDMC-2，上海三方新技术研究所生产的 SSC-921、SSC-922，天津科学器材公司仪器实验厂生产的 SPW-3 等。它们的特点是

采用汉字面板、汉字键、并采用汉字对实验参数和分析数据进行表格化打印，适合于工矿企业基层单位使用。

（二）通用计算机色谱工作站

随着计算机技术的发展，尤其是个人计算机的广泛普及，积分仪正在逐渐被通用计算机色谱工作站所代替。色谱工作站除了具有积分仪所具备的所有功能之外，其显著的特点是数据的可移植性和再用性。一台工作站上的色谱分析数据通过适当的格式可在其他计算机上调用，色谱图和分析数据可以方便地为工作站上的其他软件（如字处理软件）调用。另外，利用通用计算机的开放功能，用户还可以自己编写程序，按自己的方式使用色谱图和分析数据。

色谱工作站的硬件系统由一台通用计算机和数据采集接口，以及打印机等组成。软件部分包括数据采集；色谱峰检测；保留时间、峰面积、峰高、半峰高、峰不对称度等峰参数的计算；定性、定量结果的计算以及色谱图和分析报告的打印等。有的色谱工作站能对色谱仪进行信号反馈、反控色谱仪。

目前国外仪器厂家一般均有自己的色谱工作站，如岛津公司、Hewlett-Packard 公司、Perkin-Elmer 公司等。国内最早开展这方面研究工作的是中国科学院大连化学物理研究所，目前全国已有近 20 个单位有色谱工作站出售。其版本也已从原来的 DOS 版升级为全球流行的 Windows 版，并在向 Windows 95、Windows NT 版发展。国内研制的色谱工作站的特点是中文屏幕；可输入和打印中文信息；另外，国内的色谱工作站研制单位若不是色谱仪生产单位，则其软件一般没有仪器控制功能，但可以连接任意厂家的色谱仪。

三、气相色谱专家系统

现代色谱仪的发展目标是智能色谱仪[1,2]。它不仅是一种全盘自动化的色谱仪，而且还将具有色谱专家的部分智能。智能色谱的核心是色谱专家系统。气相色谱专家系统是一个具有大量色谱分析方法的专门知识和经验的计算机软件系统，它应用人工智能技术，根据色谱专家提供的专门知识、经验进行推理和判断，模拟色谱专家来解决那些需要色谱专家才能解决的气相色谱方法及建立复杂组分的定性定量问题。

色谱专家系统的研制始于 80 年代中期[3~6]。较有影响的是 Varian 公司的 ECAT（Expert Chromatography Assistance Team)[7]，欧洲共同体的 ESCA（Expert System in Industrial Chemical Analysis)[8~13] 及中国科学院大连化学物理研究所的 ESC (Expert System for Chromatography)[14~17]。ECAT 始于 1984 年，目的是用专家系统完成 HPLC 的方法发展，ESCA 始于 1987 年，是试验专家系统应用于药物分析时发展色谱方法的可能性。国外这些专家系统都是用于液相色谱的，使用的是小型机，唯独大连化学物理研究所的专家系统（ESC 系统）有气相和液相两大部分，可以分别用于气相色谱和液相色谱，使用的是个人微型计算机，这里主要介绍 ESC 中的气相色谱专家系统。

气相色谱专家系统的几个主要模块分别为：

①色谱分离模式推荐；

②气相色谱柱系统及样品预处理方法推荐；

③气相色谱操作条件最佳化；

④气相色谱在线定性、定量分析。

现分别略述如后。

（一）色谱分离模式推荐

同液相色谱相比，气相色谱具有仪器价格便宜、运行成本低、操作简便和高效快速等优点。所以，当样品既可以用气相色谱，又可以用液相色谱分析时，第一推荐显然为气相色谱法。故而色谱法分离模式的推荐实质是“什么样品可以用气相色谱法分析的判断”。

ESC 的气相色谱专家系统中，结合气相色谱的具体情况提出了用气相色谱法的两个具体条件[18]：①所有组分在气相色谱条件下 k 必须在 0.2～20 范围内；②总分离效能指标 $K_1 \geqslant 2.2$。在此基础上，运用结构和保留的关系，提出了相应碳链长度（CCCL）的概念，通过使用固定相特性参数（$V_{g(T)}$和 A_1）解决了气相色谱柱流出极限的预测问题。利用保留规律，从理论和实践两方面系统地分析了高效毛细管色谱柱的分离能力，得出除了碳数间峰容量不足及链状化合物中 8 位以后的相邻位置的位置异构体由于其物化性质十分相近分不开外，其他物质均可以通过调节选择性使之分开的结论。通过对含不同官能团的具有不同碳原子的化合物于不同温度下的蒸气压的系统研究，并根据色谱柱前、柱后蒸气压的变化规律，结构检测器的特性和色谱柱保留极限，阐明只要组分能从色谱柱中以合适的 k 流出，就可以被检测器(FID)检测的结论[19]。另外，还对有反应或需要特殊设备进行分析的物质也做了系统总结[20]。

根据以上研究结论，ESC 设计了能否采用气相色谱这种分离模式的推荐软件[21,22]。

（二）气相色谱柱系统推荐

为了最佳地完成特定样品的气相色谱分析，有必要从众多的可供选择的柱系统中推荐最佳的，通过系统的色谱理论研究和已发表的大量色谱实践数据相结合，在 ESC 气相色谱专家系统中，提出了 38 条柱系统推荐规则来对同系物、异构体或两者兼而有之的有机样品及沸点在 25 ℃以下的无机气体和轻烃采用气相色谱分离模式时的柱系统进行推荐（表 12-1～表 12-4），并发展了相应的软件。该软件还建立了一个以 EMG 模型为基础的谱图库，可对所推荐的柱系统及样品衍生化方法等进行验证[23]。运用气相色谱柱系统推荐专家系统的思想和方

表 12-1　分离单个同系物时柱系统推荐规则

i. 非极性化合物同系物的分析，理想的柱子为温度使用范围较宽的极性柱；极性化合物的同系物的分析，则为惰性较好的非极性柱
ii. 考虑到柱系统的实际情况，已发展的极性固定相使用温度范围较窄，因而对高分子量或低分子量化合物，只好用非极性固定相。同时，出于溶解度的原因，分析非极性化合物时选择中等极性柱较好，而由于拖尾、吸附等原因对含活泼氢的极性化合物的分析，如果没有较好的非极性柱，只好采用与溶质结构类似的固定相组成的柱子

表 12-2　分离同系物混合物时柱系统推荐规则

i. 如果仅分离分子骨架不一样的同系物的混合物（如链状与环状系列），则选择非极性相，利用构型上的差异进行分离
ii. 对于分子式差异为 2 个 H 的同系物混合物，即使利用色散力也可分离，同时也可以利用诱导效应的差异，因此：如果是非极性的具较低 CCCL 的化合物，则选择中等极性相
如果是非极性的具较高 CCCL 的化合物，则选择极性相
如果是极性化合物，则选择极性相
当用极性固定相时，极性必须合适，否则会与色散力的差异相抵消，或与另一个同系物成员的下一个碳相重
iii. 分子式差异大于 2 个 H 的同系物混合物，2 个 H 的区别足以分开，更何况尚有其他作用力的不同，分离是不成问题的。第一推荐为使用温度范围较宽的一根极性柱和另一根不拖尾的非极性柱组成的串行柱（以下简称双柱），如果没有，则参考基团增量选一极性合适的固定相制成的柱子
iv. 对于分子式无差异的同系物混合物，此处只考虑正构和异构及互为官能团异构体的情况：
如果是正构和异构的关系，则在任何固定相上都可分开，考虑到最佳柱系统的选择原则，若是非极性化合物，则选择中等极性相，否则选择非极性相
如果环大小不一样，则选中等极性相
如果互为官能团异构体，选择规则类似规则iii

法，解决大庆石化总厂化工二厂、塑料厂等一系列在线色谱柱难关，取得了明显的经济效益和社会效益[44]。

表 12-3　异构体分离时柱系统推荐规则

i. 对于结构异构体，由于常存在多种作用力所引起的交叉现象，因而最佳的柱系统为双柱。如果采用单柱，第一推荐为中等极性相。但是：

多环芳烃结构异构体的分离选 SE-52 和 SE-54 为好。普通固定相难以分离的 PAHs、PACs 异构体，可考虑用液晶等特殊固定液

烷基苯结构异构体的分离，不同对象、不同目的应有不同柱子，SE-30、Carbowax 20M 和 OV-275 是各种目的典型的候选相

ii. 对于位置异构体，一般来说，固定相极性增加后，组分间保留间隔会增加，但综合考虑起来，第一推荐为中等极性相，且对构型有影响的处于极性组分中的烷基位置异构体，在非极性相上更好（A_1 大）

iii. 几何异构体，如果是非极性组分，第一推荐是中等极性相；如果是极性组分，则选择极性固定相。结构异构体和几何异构体共存的样品，推荐用一根中等极性柱加一根非极性柱（对非极性组分）或加一根极性柱（对极性组分）是适宜的

iv. 非立体对映异构体的分离，用极性固定相；但对非极性组分，推荐用中等极性相为宜

v. 对映体的拆分，必须在手性柱上进行，固定相的选择根据衬底能提供何种相互作用来进行。以氢键相互作用为基础的 Chirasil-Val、XE-60-S-Valine-S-Phenyl ethylamide 及以包结作用为基础的环糊精是较好的候选相

表 12-4　气体分析柱系统推荐规则

i. 建议用 5A Molsieve PLOT 柱分析永久性气体，这些气体包括 He、Ne、Ar、Kr、Xe、Rn、H_2、CO、NO、N_2O、O_2、N_2、CH_4、CD_4、C_2H_6 等。但样品中必须保证无 H_2O、CO_2、SO_2 及 H_2S 等组分

ii. 要分离 O_2/N_2，同时样品中又含 H_2O、CO_2 等重组分，建议用 Carbo PLOT 007 柱，$C_1\sim C_3$ 烃也可流出

iii. 建议用 Pora PLOT 柱分析含极性和非极性组分的混合物，此柱也适合于永久性气体分析。能在此柱上分析的组分有：

CO、CO_2、H_2S、SF_6、N_2、O_2、CH_4、N_2O、NO、SO_2、NH_3、COS、水蒸气、$C_1\sim C_{10}$碳氢化合物、醇、乙二醇、酮、乙醚、氟利昂、卤代烃，以及通常在 Porapak Q、HaySep Q 或 Chromosorb 102 柱上分离的任何其他样品

iv. 对化工原料中十分重要的正丁烯、异丁烯的分离，不如采用 Al_2O_3/PLOT 柱好。后者对 $C_1\sim C_9$ 轻烯烃异构体的分离有高选择性。样品中不能存在水分、CO_2。如果 C_{10}以上烃存在，就要用厚膜甲基硅氧烷交联柱，它对低碳饱和/不饱和烯烃异构体的分离，不如 Al_2O_3/KCl 好

如果没有上述 PLOT 柱，则依后面的其他规则

v. 对于不要求分析样品中所含少量 CO_2、H_2O 等重组分，而要分别定量 H_2、O_2、CH_4、CO 的，如要快速分析，则用 13X 分子筛（Molsieve）；如要 CH_4/CO 间有较大分辨率，如痕量分析，则用 5A Molsieve

vi. 如果采用低温，则 H_2、O_2、Ar、CO 也能用 Porapak Q 分离，在低温或长柱时，5A 分子筛也能分析这些气体，不过出峰次序有所不同。因此：

当分离 O_2 中痕量 Ar 时，建议用 5A Molsieve

当分离 Ar 中痕量 O_2 时，建议用 Porapak Q

当 Ar/O_2 含量差不多时，两者均可（但用 5A 时 O_2/N_2 间分离度大）

vii. 所用仪器无低温分离设备，而要分离 O_2、N_2，同时要求分离 H_2O、CO_2 或 CH_4、C_2H_6 等重组分，建议采用碳分子筛，等温和程升均可

viii. 如果设备可用低温，要分离 O_2/N_2、O_2/Ar 的同时，还要分离 N_2O、NO、CO、CO_2、H_2S、COS、SO_2 等重组分，推荐用 Porapak Q

ix. 如果有低温程序升温设备，也可用 Porapak R，对烃的分离可一直进行到 C_9 馏分；不过，对碳氢化合物的分离情况不如用厚膜毛细管柱好

x. 惰性气体（He、Ne、Ar、Kr、Xe 等）的分离，最难分的是 He、Ne，常温下用分子筛即可，其中：

He、Ne、H_2、O_2、N_2 的分离，用 5A Molsieve 好

He、Ne、H_2、O_2、N_2、CO、CH_4 用 13X 好

xi. 化工原料中十分重要的裂解气及液化石油气的分离，须用特殊选择性柱子。其中首推苦味酸改性的 Carbopack 柱，同时 Durapak *n*-Octane、Porasil C 或 GDX-501 等均能达到目的

xii. 为了分析天然气样品中含有的烷烃和直到 C_6、C_{12}的重烃，采用非极性厚膜交联柱可取得良好的分离

xiii. 如要进一步分离 CO_2 和水分，也可采用和 Porapaks 串联的切换柱，如 Porapak Q+Porapak T/OV-1 或 Porapak R/OV-101

xiv. 当进一步分离 O_2/N_2 时，可采用 13X 分子筛、Porapaks 及非极性毛细管柱组成的三柱切换系统

续表

xv. 如果采用低温，甚至单根 Porapak R 填充柱就能实现上述目的，对烃的分离当然不如非极性毛细管柱

xvi. 合成气（或可燃性气体）的组成为 H_2、O_2、N_2、CO、CO_2、CH_4、C_2H_4、C_2H_6、C_3H_8、H_2S 等，有关这些气体的柱系统推荐规则，可根据分析目的选用规则 i～xv

xvii. 对 F_3Cl、SF_6 等含氟的腐蚀性化合物的分析，由于其腐蚀性强，只能采用含氟化合物为基质的载体和含氟化合物氟油为基质的固定液（氟油）来进行分析，所用柱管要用聚四氟乙烯

xviii. 分离 N_2、O_2、F_2 时，也可采用这种柱系统，但应采用长柱，而 F_2/O_2 的分离，要采用银柱吸收的方法

xix. 这样的柱型也可用于含氟的硫化物和金属含氟，从至含氟、含硫化合物的分析，其他腐蚀性的无机卤化物也要采用这种柱系统

xx. 对于 C_1～C_2 有机气态卤化物的分离，如果用填充柱，建议采用 Porapak QS 或 Chromosil 310。如果用毛细管柱，建议采用厚膜 Carbowax 20M 交联柱

xxi. 对于 COS、H_2S、CS_2、SO_2 的分离，视 H_2S 与 CS_2 含量多少，可分别采用 Chromosil 310、330 或 Porapak QS、Supelpak QS，其中前二者适于 H_2S 含量高的情况，后二者适于 COS 含量高或含水的情况

xxii. 除上述气体外，采用 Chromosil 330 或 Porapak QS 也可分离 C_1～C_3 硫醇和硫醚，$\mu l \cdot L^{-1}$级也行。Polyphenyl ether/H_3PO_4 涂于 Chromosorb T 也可分离 $\mu l \cdot L^{-1}$级以下的上述气体。当痕量分析时，柱管需用聚四氟乙烯管

xxiii. 使用 Carbopack B/XE-60/H_3PO_4 填料，在玻璃柱上即可实现对 C_2 硫化物异构体的基线分离，费用比聚苯醚低，这一柱系统也适于 SF_6、H_2S 和 COS 的分离，这在聚苯醚上是不可能的

xxiv. 对氮和它的氧化物 N_2O、NO 的分离，建议采用 5A Molsieve 柱或 Porapak Q 柱，但须注意 NO_2 的反应性

xxv. 碱性氮化物如氨、甲氨等的分离，建议采用 Chromosorb 103

xxvi. 对于同位素的分离，只要质量上有区别，利用其色散力的差别，可用高效气相色谱柱进行分离，这种柱子一般比较特殊，如

氢的同位素的分离，可采用 $Fe(OH)_3$ 腐蚀的 Al_2O_3 填充柱或 5A Molsieve PLOT 石英柱（75m×0.32mm），它们均可使 H_2、D_2、HD、HT、T_2、DT 得到分离

氮的同位素的分离，可采用 60m×4mm 的涂 1%角鲨烷于石墨化炭黑柱，使 N_2^{14}、N_2^{15}得到分离，载气 H_2 中加进 CO 以使表面失活。相同的填料也适用于 −78℃时 CH_4 与 CH_3D 的分离

当采用 NaOH 腐蚀的 47m×0.22mm 玻璃毛细管柱，并用 N_2-He 作载气，可分离甲烷的同位素化合物，64m×0.22mm 的活性硅胶柱也行

氧的同位素的分离，用 NaOH 腐蚀的 173m×0.3mm 玻璃毛细管柱，并用 N_2-He 作载气，可分离 O_2^{16}和 O_2^{18}

氖的同位素的分离，采用 72m 经腐蚀的玻璃毛细管柱，在−254℃可分离 Ne^{20}和 Ne^{22}，载气为 He+5%H_2

由于气相色谱分离同位素不是最方便的方法，因此用得不广泛

xxvii. 硅烷、硼烷、锗烷、磷烷和砷化氢等有很大毒性，但在色谱上的分离并不困难，多孔聚合物或非极性柱均可。砷烷中氯硅烷也能由非极性的角鲨烷柱测定

（三）气相色谱操作条件最佳化

只有在选择了合适柱系统的基础上，操作条件的最佳化才有可能进行。ESC 气相色谱专家系统的研究小组先后研究了不对称峰的最佳操作温度预测[24]，三步串行优化法与任意多阶梯优化法[25～29]及人工干预优化法[28]，并发展了智能优化程序[29,30]。不同情况下，专家系统采用不同的优化策略和优化指标，以保证各种情况下得到的分离条件是最佳的。

1. 单纯型（Simplex）优化方法

Simplex 优化方法是色谱中最常用的一种方法。ESC 气相色谱专家系统采用改进的 Simplex 优化方法完成实际样品在线自动全局优化，该方法寻优框图见图 12-3。

该寻优策略的最大特点是采用了人工智能宽度优先搜索，找到可能的各个分离区间。在大范围内避免了局部优化现象的发生，在较大分离范围内选出最佳分离区间使之出峰数最多，然后在最佳分离区间内选最大分离点。该方法采用的优化指标为

$$HCRF = 100000 \times N + 1000 \times K_3 + (100 - t)$$

式中，N 为出峰个数，K_3 为峰高分离度，t 为最后一个峰的保留时间。

在 ESC 气相色谱专家系统中，采用 Simplex 优化方法的目的有两个，一是作为对不太复

杂样品的在线自动优化，二是作为智能优化的基础，用该方法获得最佳初始实验数据。

2. 窗口图形法（Window Diagram，简称 WD）

WD 方法最初是用于气相固定液组成优化，后被发展成一个单变量全局优化的经典方法。该方法首先必须利用两次以上初始实验数据，获得各组分的保留规律，并通过人工识别色谱峰的交叉和重叠，然后以组分峰的相对保留值 r 或分离度 R_s 为纵坐标，以柱温为横坐标作图。所有交叉组分在整个温度区间内会得到一系列的窗口。从得到的窗口图形中可以容易地找出最佳温度条件。在 ESC 气相色谱专家系统中采用此方法优化等温最佳分离温度区间及温度点。

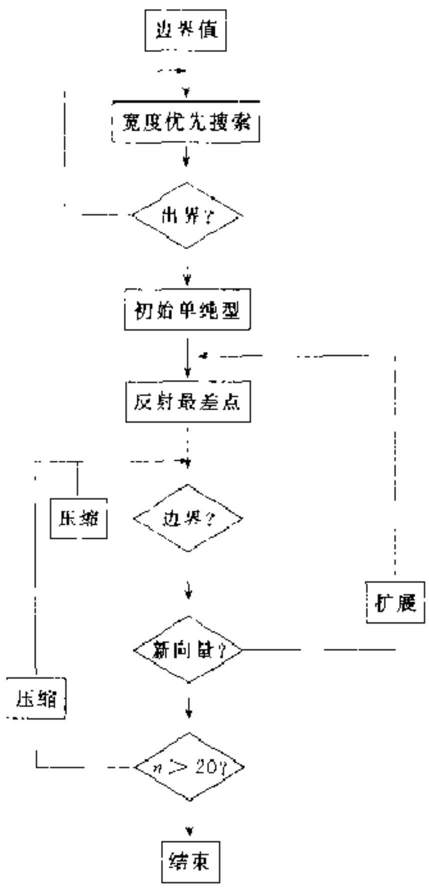


图 12-3　Simplex 方法寻优框图

3. 最小分离图形法

该方法是在重叠分离图形（ORM）法的基础上，利用计算机图形处理技术发展的双变量优化方法。该方法对于已知保留规律的样品，可直接构造其三维分离图形（柱温 T，升温速率 T_P，最小分离度 R_{Smin}），可直观地得到最佳分离区域和最佳分离参数点。在 ESC 气相色谱专家系统中，采用该方法来获得样品分离条件的综合信息。

4. 智能优化法

智能优化的目的是要发展一种通用的优化方法，对于任何样品，不论其中交叉组分有多少，均能有效地避开交叉点的温度，实现各组分分离，而且保证分析时间最短。ESC 气相色谱专家系统以溶质在柱内迁移理论和 EMG 函数为基础，采用计算机仿真技术模拟溶质在柱内的运动过程，在此基础上，发展了智能优化软件。下面是智能优化程序的设计原理。

气相色谱温度最佳化的目的是发展一个柱温程序 $T_{P(t)}$，使给定混合物中感兴趣物质对的总分离效能指标 K_1 遵守：

$$K_1 \geqslant K_{1req} \tag{12-1}$$

同时最后一个组分的保留时间 $t_{r,F}$ 最小：

$$t_{r,E}=\min \tag{12-2}$$

式中 K_{1req} 为定量分析精度所要求的总分离效能指标。

已知组分谱带在柱内移动速度 dx/dt 与载气线速 u、容量因子 k、柱长 L、死时间 t_0 有如下关系：

$$\frac{dx}{dt}=\frac{u}{1+k}=\frac{L}{t_0(1+k)} \tag{12-3}$$

在一定的时间间隔内，某一组分在柱内移动的距离 ΔX_i 为：

$$\Delta X_i=\int_{t_{i-1}}^{t_i}\frac{L}{t_0(1+k)}\cdot dt \tag{12-4}$$

t_{i-1}、t_i 分别为组分移动 ΔX_i 段路程的起始和终了时间。对于任意多阶程序升温中升温速率 γ

为 0 的过程：

$$\Delta X_i = \frac{t_i - t_{i-1}}{t_0(1+k)} \cdot L \tag{12-5}$$

对于 γ 不为 0 的过程：

$$\Delta X_i = \frac{1}{\gamma_i}\int_{T_{i-1}}^{T_i} \frac{L \cdot \mathrm{d}T}{t_0(1+k)} \tag{12-6}$$

T_i、T_{i-1}为升温段开始和终了时的温度。

由于智能优化的特点是每一个阶梯针对其一对最难分离物质对进行的，因此每阶的难分离对流出后，马上升温过渡到下一阶梯（图 12-4）。设组分在第 k 个阶梯流出。对于升温段流出的峰 p，保留时间 $t_{r(p)}$为：

$$t_{r(p)} = t_{r(no_1)} + \frac{T_p - T_{k-1}}{\gamma_k} \tag{12-7}$$

式中，$t_{r(no_1)}$为第 $k-1$ 个阶段最后一个流出峰（no_1）的保留时间，T_p 为峰 p 的流出温度；γ_k 为第 k 阶的程升速率，T_{k-1}为$k-1$阶的终温，也是第 k 阶的初温。

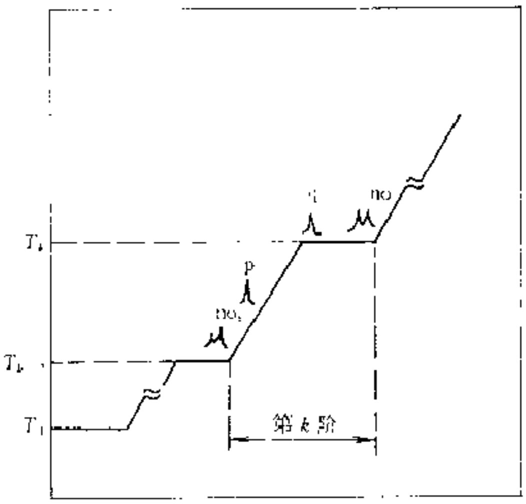


图 12-4　第 k 个阶梯组分的流出特征

对在第 k 阶等温段流出的峰 q，保留时间 $t_{r(q)}$为：

$$t_{r(q)} = t_{r(no_1)} + \frac{T_k - T_{k-1}}{\gamma_k} + [1 - m(q)] \cdot t_{r(T_k)} \tag{12-8}$$

式中，$m(q)$为此组分经历了 $k-1$ 个阶梯及第 k 阶的升温段后所走过的柱长分数；$t_{r(k)}$为此组分在 k 阶终温 T_k 等温分离时的等温保留时间。

经历 k 个阶梯后，未流出组分所经过的柱长分数 m^k 可由式（12-9）求出：

$$m^k = m^{k-1} + \frac{1}{\gamma_k}\int_{T_{k-1}}^{T_k} \frac{\mathrm{d}T}{t_0(1+k)} + \frac{t_{iso}}{t_0(1-k_{(T_k)})} \tag{12-9}$$

式中，m^{k-1}为经历了 $k-1$ 个阶梯后此组分走过的柱长分数，$k_{(T_k)}$为 T_k 时的容量因子，t_{iso}为 k 阶的等温段时间，可由下式计算：

$$t_{iso} = t_{r(no)} - t_{r(no_1)} - \frac{T_k - T_{k-1}}{\gamma_k} \tag{12-10}$$

其中 $t_{r(no)}$为第 k 阶的最后一个流出峰（no）的保留时间。

当 $m^{(k)} = 1$ 时，组分流出柱子，总分离效能指标 K_1 可用下式计算：

$$K_1 = \frac{t_{r(i)} - t_{r(i-1)}}{w_{h(i)} - w_{h(i-1)}} \times 2 \tag{12-11}$$

式中，$w_{h(i)}$、$w_{h(i-1)}$分别为流出峰 i、$i-1$ 的半高峰宽（$t_{r(i)} > t_{r(i-1)}$），其值可由虚拟保留时间[27]来预测，原因是在等温下，w_h 与 t_r 有如下的近似线性关系：

$$w_h = a_4 \cdot t_r + b_4 \tag{12-12}$$

这个关系也适用于某一确定范围的不同温度，因此可用等温状态下的半高峰宽通过引入的虚

拟保留时间概念，近似地计算程升下的半高峰宽。

k，t_0 与温度 T 有下列关系：

$$\ln k=\frac{a_1}{T}+b_1 \tag{12-13}$$

$$t_0=a_3T+b_3 \tag{12-14}$$

式中，a_1、b_1、a_3、b_3 均为常数，故原则上只需作（2～3）次等温试验，回归出式（12-12）～式（12-14），即可预测组分在任意多阶程升条件下的保留时间和半高峰宽，进行 k_1 的计算和色谱柱温的智能优化。

有关智能优化软件设计和应用的详细例子，请参看文献［29，30，40～48］。

（四）气相色谱在线定性、定量软件

许多色谱数据站都有在线定性、定量功能，但其定性、定量软件只起自动化的作用，ESC 气相色谱专家系统，力求的是要起智能化的作用。

用物质的特征值（例如保留值或质谱棒图）可对色谱峰进行定性已为色谱工作者公认。以利用保留值进行定性而言，只要用个人计算机将色谱流出曲线的色谱峰保留指数实验值，与储存其中的在相同柱温和固定液时该物质的保留指数文献值（已知值）相对照，若两数值之差不大于实验误差值的范围，则可判定该色谱峰可能是该物质，否则可肯定不是该物质。这种方式只是不需用人工检索，做到色谱峰的自动化定性，许多色谱数据站就是这样在线定性的，而且显然可见，此自动化定性存在以下难解的困难：

①个人计算机存贮空间有限，难以储存巨量的不同柱温和固定液时物质的保留指数文献值。

②色谱分析所用的柱温与固定液必须与个人计算机储存的保留指数文献值的柱温与固定液相同，否则不能进行定性判定。

③若缺乏某物质保留指数文献值，则无法判断有无该组分。

ESC 气相色谱专家系统智能定性方法，针对这些困难，提出了合理的解决途径，其核心是只储存物质在一个柱温和固定液时的保留指数文献值，在一定范围内，可利用储存的少数与柱温、固定液有关的参数，预测其他柱温或/及固定液时的计算值，用其供作定性。现以对 C_5～C_9 碳氢化合物的智能定性作说明：

（1）利用 $I^{sq}_{50,(M)}$ 求 $I^{sq}_{T,(M)}$　可以很容易获得准确的 C_5～C_9 碳氢化合物在柱温为 50 ℃和固定液为角鲨烷的保留指数 $I^{sq}_{50,(M)}$，由其求出其他柱温的保留指数 $I^{sq}_{T,(M)}$ 也是不难的。

$$I^{sq}_{T,(M)}=I^{sq}_{50,(M)}+(T-50)\frac{\partial I}{\partial T} \tag{12-15}$$

式中 $\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$ 是物质（M）在角鲨烷柱上，柱温改变 1 ℃时保留指数的变化值，从保留指数表达式推导出 C_5～C_9 碳氢化合物各类化合物在角鲨烷柱上的关系式。

烷烃类：$$\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)=0.0394m_2+0.0657m_3+0.0351m_4+0.1037e_3+0.0450e_4 \tag{12-16}$$

环戊烷类：$$\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)=0.1380+0.0237N \tag{12-17}$$

环己烷类：$$\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)=0.2080+0.0389N \tag{12-18}$$

烷基苯类：$$\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)=0.2400-0.0008N-0.0132w \tag{12-19}$$

（2）利用$I^{sq}_{T,(M)}$求$I^{p}_{T,(M)}$　欲求C_5～C_9碳氢化合物在任一柱温和任一固定液的保留指数时，例如柱温为T和固定液为p的保留指数时，利用上述$I^{sq}_{T,(M)}$值就成为求解双柱的保留值换算问题，我们依据液体均一位势模型，用统计力学方法推导出双柱的保留指数换算关系式。

烷烃类：$I^{p}_{T,(M)}=I^{sq}_{T,(M)}+A_0[100M-I^{sq}_{T,(M)}]+C_2m_2+C_3m_3+C_4m_4+C_3e_3+C_4e_4$　(12-20)

环烷类：$I^{p}_{T,(M)}=I^{p}_{T,(基)}+A_1[I^{sq}_{T,(M)}-I^{sq}_{T,(基)}]+B_1N$　(12-21)

烷基苯类：$I^{p}_{T,(M)}=I^{p}_{T,(苯)}+A_2[I^{sq}_{T,(M)}-I^{sq}_{T,(苯)}]+B_2N+DW+EY$　(12-22)

关系式（12-16）至式（12-22）中，A、B、C、D、E都是与固定相有关的换算参数；M、m、e分别表示异构烷烃的碳数、在不同位置的甲基和乙基的数目；N为环烷烃或烷基苯芳烃取代基上的碳原子数目；W是与取代基相对位置有关的结构因子；Y是取代基数目，都是组分的分子结构参数；sq与p分别表示角鲨烷及另一固定液；T为柱温；（M）为某组分名称，如（苯）表示组分为苯；（基）表示某一基元组分（环戊烷、环己烷等）名称。

（3）用编出的计算机程序进行定性　用个人计算机将色谱流出曲线的色谱峰保留指数实验值，与上述计算出的$I^{p}_{T,(M)}$相对照，就可对色谱峰进行定性判定。应该指出，所得的$I^{sq}_{T,(M)}$值与$I^{p}_{T,(M)}$值的计算值与文献值的差不可过大，否则计算值就不可取代后者用于定性，研究结果表明两者差值不大，可满足要求[31~36]。编出的C_5～C_9碳氢化合物在线智能定性计算机程序见本章第二节。将其用在Perkin-Elmer公司Sigma 1型气相色谱仪上在线定性的结果可见文献[37]。

还可指出，个人计算机采集检测器输出的电信号和检定色谱峰的方法是非常重要的。若其有失误，则将影响色谱分析的定性和定量结果。ESC气相色谱专家系统设计的色谱峰采集和检定方法由于结合了数字滤波、面积门槛值和增加斜率法等多种检测方法，既利于去掉噪声，又不漏掉色谱峰，故能得到令人满意的结果。从表12-5可知，将色谱信号同时输入Perkin-Elmer公司的Sigma 10、3600型数据站，岛津公司CRIB型积分仪和中国科学院大连化学物理研究所早期研制的数据站[38]，唯后者能检测出第5、8和17号色谱峰（其中第5与8号色谱峰是小峰，第17号色谱峰是肩峰），表明后者编的程序检测灵敏度高，检出肩峰能力强。

表12-5　不同色谱数据站定性、定量结果的比较

数据站	PE Sigma 10		PE 3600		岛津C RIB		大连化学物理研究所IBM-PC/XT		
方法	胶带法								拟合法
色谱峰	t_R/min	A/%	t_R/min	A/%	t_R/min	A/%	t_R/min	A/%	A/%
1	2.17	0.06	2.17	0.05	2.16	0.05	2.17	0.05	0.05
2	2.52	1.21	2.51	1.25	2.50	1.23	2.51	1.24	1.24
3	2.69	2.84	2.68	2.92	2.69	2.84	2.69	2.89	2.83
4	2.79	2.52	2.78	2.52	2.78	2.51	2.78	2.52	2.58
5		—	—	—	—	—	2.95	0.04	0.04
6	3.11	4.72	3.10	4.85	3.10	4.71	3.10	4.79	4.57
7	3.26	5.54	3.25	5.60	3.25	5.52	3.25	5.58	5.62
8	—		—	—		—	3.62	0.02	0.02
9	3.67	0.08		—	—		3.66	0.03	0.03
10	3.75	5.66	3.74	5.69	3.75	5.85	3.75	5.74	6.41
11	3.83	15.16	3.82	15.80	3.82	15.02	3.83	15.40	14.73
12	4.07	13.85	4.07	14.09	4.07	13.80	4.06	13.99	13.99
13	4.40	8.28	4.39	8.36	4.39	8.50	4.39	8.34	8.34
14	4.65	0.28	4.63	0.07	—	—	4.63	0.19	0.19

续表

数据站	PE Sigma 10		PE 3600		岛津 C-RIB		大连化学物理研究所 IBM-PC/XT		
方法	胶带法								拟合法
色谱峰	t_R/min	A/%	t_R/min	A/%	t_R/min	A/%	t_R/min	A/%	A/%
15	4.79	4.28	4.78	4.40	4.79	4.36	4.78	4.29	4.93
16	4.87	5.30	4.87	5.06	4.87	5.14	4.86	4.03	3.84
17		—	—		—	—	4.90	1.27	1.24
18	4.98	6.86	4.97	7.02	4.97	6.88	4.97	6.95	6.52
19	5.19	0.72	5.18	0.44	5.18	0.72	5.18	0.57	0.57
20	5.29	0.19	—	—	5.29	0.18	5.28	0.12	0.12
21	5.43	6.20	5.42	6.24	5.42	6.19	5.45	6.02	6.61
22	5.48	6.77	5.47	6.70	5.47	6.75	5.47	6.97	6.38
23	5.77	0.43	5.75	0.21	5.76	0.39	5.75	0.29	0.29
24	6.00	8.27	5.98	8.62	5.99	9.29	5.98	8.55	8.55
25	6.31	0.26	6.30	0.11	6.30	0.07	6.30	0.11	0.11

即使选用最佳的气相色谱柱系统和操作条件，色谱分析时仍难免出现组分分离不完全的情况(即出现重叠峰)。一些色谱数据站对重叠情况为峰谷高于小峰的峰半高时用峰谷垂线法处理(参见图 9-9)，小峰在大峰尾部时用连线处理(参见图 9-7)，但这不是良好的办法[39]，最好采用基于EMG模型的曲线拟合法来解决重叠峰的定量问题[40~42]。从表 12-5 可知，对于完全分离的色谱峰，不同数据站用胶带法与拟合法所得的定量结果的面积百分比基本相同；对于没有完全分离的色谱峰，如色谱峰 10 与 11，峰 15、16、17 与 18，峰 21 与 22，给出的结果就有差别了，拟合法智能定量的结果无疑更准确。现在 ESG 气相色谱专家系统应用曲线拟合法时，先在计算机屏幕上显示色谱图，利用减扣法更好地解决 σ、τ 数值难以求准确的问题，然后用色谱峰分析软件解析色谱峰[48,49]；同时应用快速傅里叶变换法平滑色谱流出曲线的噪声，可将信噪比提高 17 倍[50]，改进微弱信号的检出。

总起来说，气相色谱专家系统经过 10 多年的历程，已取得很大进展和一批可喜的成果，在生化、环保、石油化工等生产实践中愈加显示出其价值[44]；可以预测，今后新的针对某些特定领域问题、新的专用性专家系统软件将不断推出，可解决更多的各种实际问题。

第二节　气相色谱典型程序

在气相色谱日常分析和智能色谱法的研究工作中，中国科学院大连化学物理研究所色谱法研究人员和研究生曾用个人计算机编写了大量的计算机程序，其中仅部分可见于文献[26，43]。现选出 14 个典型程序如后，这些程序制作得很粗糙，仅作抛砖引玉之用。

以下所列程序有几点要先作说明：

(1) 要求输入的时间以 60 进位的分为单位，小数点前的数字表示分，小数点后的数字表示秒。如 4min25s 以 4.25 表示。程序输出的时间也是以 60 进位的分来表示。

(2) 程序计算采用的温标为绝对温标。但为照顾人们的习惯，输入、输出温度均为摄氏温度。

(3) 有些程序要求输入成批数据。当全部数据输完后，需键入一批 0 作为数据结束标记。键入 0 的个数应等于每按一次 Enter 键输入数据的个数。

(4) 程序 12.1～12.11 中均有详细的说明，指出各个程序的具体用途及如何操作等。程序 12.12～12.14 的有关原理请参阅本章第一节中气相色谱在线定性、定量软件部分。

以下是这 14 个程序的名称或(及)用途与原程序。

【程序 12-1】 最小二乘法计算容量因子与柱温的关系($\ln k=a+b/T$)中的系数

```
10 DEF FNT(X)=60*INT(X)+100*(X-INT(X))
20 CLS
30 KEY OFF
40 SCRESN 1
50 COLOR 1,3
60 DIM T(1000),K(1000)
70 PRINT TAB(5);"物质的保留值与柱温有关,对于液相色谱,";
80 PRINT"气相色谱均有:"
90 PRINT TAB(6);"lnk=a+b/T"
100 PRINT"其中a,b为常数,本程序采用最小二乘法求取";
110 PRINT"上述方程的系数,在进行计算之前,请预先测定";
120 PRINT"若干温度下的保留时间,死时间."
130 FOR I=0 TO 319 STEP 3
140 PSET(I,199)
150 NEXT I
160 A¥=INKEY¥
170 IF A¥="" GOTO 160
180 CLS
190 COLOR 1,4
200 PRINT TAB(10);"柱管名";
210 INPUT A¥
220 PRINT TAB(5);"请给出柱温,死时间以及保留时间"
230 PRINT TAB(7);"数据送完后请输(0,0,0)
240 FOR I=1 TO 1000
250 PRINT TAB(5);I;
260 INPUT T,TO,K(I)
270 IF K(I)=0 GOTO 350
280 K(I)=FNT(K(I))
290 TO=FNT(TO)
300 K(I)=K(I)/TO-1
310 K(I)=CINT(1000*K(I))/1000
320 T(I)=T+273.16
330 N=N+1
340 NEXT I
350 FOR I=1 TO N
360 A=A+1/T(I)
370 B=B+LOG(K(I))
380 C=C+1/T(I)^2
390 D=D+LOG(K(I))/T(I)
400 NEXT I
410 Z=N*C-A*A
420 K1=(B*C-A*D)/Z
430 K2=(N*D-A*B)/Z
```

```
440 CLS
450 BEEP
460 PRINT TAB(5);"组分:";A¥
470 PRINT TAB(5);"lnk-";K1;"+";K2;"/T"
480 PRINT" "
490 PRINT "编号";TAB(8);"T(C)";TAB(15);"k exp.";TAB(24);"k cal.";TAB(33);"偏差"
500 FOR I=1 TO N
510 GOSUB 650
520 A=K-K(I)
530 A=CINT(1000*A)/1000
540 PRINT TAB(2);I;TAB(8);T(I)-273.16;TAB(15);K(I);TAB(24);K;TAB(33);A
550 NEXT I
560 I=I+1
570 X CSRLIN
580 PRINT TAB(2);I-1;TAB(7);
590 INPUT T
600 T(I)=T+273.16
610 GOSUB 650
620 LOCATE X,24
630 PRINT K
640 GOTO 560
650 K=EXP(K1+K2/T(I))
660 K-CINT(1000*K)/1000
670 RETURN
```

【程序 12-2】 色谱保留值换算,由组分的保留时间计算其 k、保留指数、壬烷值

```
10 DIN T(15),B(10)
20 DEF FNT(X)=60*INT(X)+100*(X-INT(X))
30 CLS
40 SCREEN 1,1
50 COLOR 1,7
60 PRINT TAB(5);"色谱保留值可有多种表示方法,如保留时";
70 PRINT "间,保留指数,壬烷值等."
80 PRINT TAB(5);"本程序用于 GC 保留值的换算."
90 PRINT TAB(4);"请输入死时间(t0);"
100 INPUT T(0)
110 PRINT TAB(4);"请输入正构烷烃 C5 到 C15 的保留时间"
120 PRINT TAB(6);"(缺少的数据可用 0 代替)"
130 PRINT TAB(6);
140 INPUT T(5),T(6),T(7),T(8),T(9),T(10),T(11),T(12),T(13),T(14),T(15)
150 CLS
160 FOR I=0 TO 15
170 T(I)=FNT(T(I))
180 NEXT I
190 FOR I=5 TO 15
```

```
200  T(I)=T(I)-T(0)
210  NEXT I
220  FOR I=5 TO 15
230  IF T(I)<=0 GOTO 290
240  A=A+I^2
250  B=B+I
260  C=C+I*LOG(T(I))
270  D=D+1
280  E=E+LOG(T(I))
290  NEXT I
300  Z=A*D-B*B
310  K1=(C*D-B*E)/Z
320  K2=(A*E-B*C)/Z
330  FOR I=0 TO 10
340  IF T(I+5)<=0 THEN T(I+5)=EXP(K1*(I+5)+K2)
350  B(I)=LOG(T(I+5))
360  NEXT I
370  X=T(15)+T(0)
380  A=INT(X/60)
390  B=INT(X-60*A)
400  BEEP
410  PRINT "编号";TAB(6);"保留时间";TAB(16);"k";TAB(23);"保留指数";TAB(34);"千烷值"
420  M=M+1
430  JJ=CSRLIN
440  PRINT TAB(1);M;TAB(6);
450  INPUT T
460  T=FNT(T)
470  N=0
480  T1=T-T(0)
490  IF T1=<0 GOTO 420
500  IF T1<T(5) GOTO 570
510  IF T1>=T(15) GOTO 560
520  FOR I=0 TO 10
530  IF T1>=T(I+5) AND T1<T(I+6) GOTO 570
540  N=N+1
550  NEXT I
560  N=9
570  A=100*(N+5+(LOG(T1)-B(N))/(B(N+1)-B(N)))
580  K=T1/T(0)
590  K1=T1/T(9)
600  A=INT(10*A+.5)/10
610  K=INT(1000*K-.5)/1000
620  K1=INT(1000*K1+.5)/1000
630  B=INT(T/60)
```

```
610  C=INT(T-60*B)
650  LOCATE JJ,16
660  PRINT K;TAB(24);A;TAB(34);K1
670  GOTO 420
```

【程序 12-3】 烃类化合物的离线定性程序

```
10  KEY OFF
20  SCREEN 1,1
30  COLOR 4,7
40  CLS
50  PRINT TAB(5);"保留指数是气相色谱定性的重要依据.本";
60  PRINT "程序根据这个原理运用保留指数对碳氢化合物离线定性鉴别."
70  PRINT TAB(5);"请问采用的固定相:"
80  PRINT TAB(7);"1.鱼鲨烷"
90  PRINT TAB(7);"2.OV-101"
100  PRINT TAB(7);"3.乙酰基柠檬酸三丁酯"
110  PRINT TAB(7);"4.SE-30"
120  PRINT TAB(9);"(回答1.2.3或4)"
130  PRINT TAB(15);
140  INPUT C
150  IF C=4 THEN C=2
160  CLS
170  LOCATE 4,8
180  PRINT TAB(7);"采用的柱温是多少度";
190  INPUT T
200  H=248
210  DIM A¥(31,251),A(251),B(300),C(5),D(5),T(5),I(300),B¥(31)
220  DEF FNX(T)=INT(T)+(T-INT(T))/.6
230  FOR J=0 TO H
240  READ A¥(31,J)
250  NEXT J
260  IF C=1 GOTO 290
270  FOR I=0 TO H:READ A,B:NEXT I:IF C=2 GOTO 290
280  FOR I=0 TO H:READ A.B:NEXT I
290  FOR I=0 TO H:READ A.B:A(I)=INT(10*(A+B*(T-50))+.5)/10:NEXT I
300  CLS
310  COLOR 5,7
320  PRINT TAB(5);"本程序有二种使用方法";
330  PRINT "1.根据保留指数查化合物的名字"
340  PRINT "2.根据化合物的名字查化合物的保留指数"
350  PRINT TAB(12);"(回答1或2)"
360  PRINT TAB(16);
370  INPUT A
380  CLS
390  COLOR 6,7
```

```
400  IF A=2 GOTO 1640
410  IF A=1 GOTO 430
420  GOTO 320
430  PRINT TAB(7);"请问输入的数据形式是";PRINT TAB(9);"1.保留指数"
440  PRINT TAB(9);"2.保留时间"
450  PRINT TAB(13);
460  INPUT D
470  IF D=1 GOTO 1100
480  IF D=2 GOTO 500
490  GOTO 430
500  PRINT TAB(5);"请给出甲烷的保留时间;"
510  INPUT T(0)
520  PRINT TAB(5);"还有 C5,C6,C7,C8,C9 正构烷烃的保"
530  PRINT "留时间"
540  PRINT TAB(7)
550  INPUT T(1),T(2),T(3),T(4),T(5)
560  FOR I=0 TO 5:T(I)=FNX(T(I)):NEXT I
570  A=0:B=0:C=0:D=0:E=0
580  FOR I=1 TO 5
590  IF T(I)=0 GOTO 650
600  A=A+(I+4)^2
610  B=B+4+I
620  C=C+(I+4)*LOG(T(I)-T(0))
630  D=D+1
640  E=E+LOG(T(I)-T(0))
650  NEXT I
660  Z=A*D-B*B
670  K1=(C*D-B*E)/Z
680  K2=(A*E-B*C)/Z
690  FOR I=1 TO 5
700  IF T(I)=0 THEN T(I)=EXP(K1*(I+4)+K2)+T(0)
710  NEXT I
720  A5=INT(T(0))
730  A6=INT(60*(T(0)-A5)+.5)
740  CLS
750  PRINT TAB(7);"组分的保留时间"
760  FOR I=0 TO 300
770  PRINT TAB(11);
780  INPUT B(I)
790  B(I)=FNX(B(I))
800  IF B(I)=0 GOTO 830
810  M=M+1
820  NEXT I
830  CLS
```

```
840  PRINT TAB(5);"正负偏差范围(保留指数单位)";
850  INPUT E
860  CLS
870  FOR I=1 TO 4
880  A=T(I)-T(0)
890  B=T(I+1)-T(0)
900  D(I)=LOG(B/A)
910  C(I)=100*(I+4-LOG(A)/D(I))
920  NEXT I
930  CLS
940  D(5)=D(4)
950  C(5)=C(4)
960  FOR I=0 TO 300
970  IF B(I)<T(0) GOTO 1050
980  A=B(I)-T(0)
990  B=100*LOG(A)
1000  N=1
1010  FOR J=1 TO 5
1020  IF B(I)>=T(J) THEN N=J
1030  NEXT J
1040  I(I)=INT (10*(C(N)+B/D(N)+.5)/10
1050  NEXT I
1060  PRINT TAB (5);"查化合物名"
1070  BEEP
1080  PRINT TAB (1);"编号";TAB(7);"组分";TAB(13);"保留时间";TAB(22);"I(exp.)";TAB(32);"I
      (tab.)"
1090  GOTO 1260
1100  PRINT,"正负偏差范围(保留指数单位)";
1110  INPUT E
1120  CLS
1130  PRINT,"保留指数(数据结束请键入 0)"
1140  FOR J=0 TO 300
1150  PRINT,
1160  INPUT I(J)
1170  M=M+1
1180  IF I(J)=0 GOTO 1220
1190  NEXT J
1200  PRINT,"正负偏差范围(保留指数单位)";
1210  INPUT E
1220  CLS
1230  BEEP
1240  PRINT,"查化合物名字"
1250  PRINT TAB(1);"编号";TAB(7);"化合物";TAB(22);"I(exp.)";TAB(32);"I(tab.)
1260  FOR J=0 TO M-1
```

```
1270  IF D=2 AND B(J)=0 GOTO 1610
1280  IF D=1 AND I(J)=0 GOTO 1610
1290  N=0
1300  X=0
1310  IF J>8 THEN X=1
1320  IF J>98 THEN X=2
1330  FOR I=0 TO H
1340  IF I(J)=0 GOTO 1490
1350  IF ABS(I(J)-A(I))>E GOTO 1490
1360  N=N+1
1370  IF D=1 GOTO 1450
1380  IF N>1 GOTO 1430
1390  A5=INT(B(J))
1400  A6=INT(60*(B(J)-A5)+.5)
1410  PRINT TAB(2-X);J-1;TAB(6);A¥(31,I);TAB(12);A5;"'";A6;"''";TAB(22);I(J);TAB(32);
      A(I)
1420  GOTO 1490
1430  PRINT TAB(6);A¥(31,I);TAB(32);A(I)
1440  GOTO 1490
1450  IF N>1 GOTO 1480
1460   PRINT TAB(2-X);J-1;TAB(6);A¥(31,I);TAB(22);I(J);TAB(32);A(I)
1470  GOTO 1490
1480  PRINT TAB(6);A¥(31,I);TAB(32);A(I)
1490  NEXT I
1500  IF D=1 GOTO 1550
1510  A5=INT(B(J))
1520  A6=INT(60*(B(J)-A5)+.5)
1530  IF N=0 THEN PRINT TAB(2-X);J+1;TAB(8);"未知峰";TAB(12);A5;"'";A6;"''";TAB(22);
      I(J)
1540  GOTO 1560
1550  IF N=0 THEN PRINT TAB(2-X);J+1;TAB(8);"未知峰";TAB(22);I(J)
1560  FOR Q=0 TO 319 STEP 3
1570  PSET (Q,199)
1580  NEXT Q
1590  JJ¥=INKEY¥
1600  IF JJ¥=""GOTO 1590
1610  NEXT J
1620  KEY ON
1630  END
1640  CLS
1650  PRINT TAB(10)"查化合物的保留指数"
1660  PRINT TAB(5)"(请用大写字母键入英文名)"
1670  PRINT TAB(2);"编号";TAB(12);"化合物";TAB(30);"保留指数"
1680  M=M+1
```

```
1690  N=0
1700  V=CSRLIN
1710  X=0
1720  IF M>9 THEN X=1
1730  IF M>99 THEN X=2
1740  PRINT TAB(2-X);M;TAB(5);
1750  INPUT B¥
1760  LOCATE V,33
1770  FOR I=0 TO H
1780  IF A¥(31,I)=B¥ AND A(I)>90 GOTO 1820
1790  NEXT I
1800  IF N=0 THEN PRINT "无";B¥;"的数据"
1810  GOTO 1680
1820  N=N+1
1830  PRINT A(I)
1840  GOTO 1680
1850  DATA 2-ME-BUTANE,N-PENTANE,2. 2-DI-ME-BUTANE,2. 3-DI-ME-BUTANE,2-ME-PEN-
      TANE,3-ME-PENTANE,N-HEXANE,2. 2-DI-ME-PENTANE,2. 4-DI-ME-PENTANE,2. 2. 3-
      TRI-ME-BUTANE
1860  DATA 3. 3-DI-ME-PENTANE,2-ME-HEXANE,2. 3-DI-ME-PENTANE,3- ME-HEXANE,3-ETH-
      PENTANE,2. 2. 4-TRI-ME-PENTANE,N-HEPTANE,2. 2-DI-ME-HEXANE,2. 2. 3. 3-TETRA-
      ME-BUTANE,2. 5-DI-ME-HEXANE
1870  DATA 2. 4-DI-ME-HEXANE,2. 2. 3-TRI-ME-PENTANE,3. 3-DI-ME-HEXANE,2. 3. 4-TRI-ME-
      PENTANE,2. 3. 3-TRI-ME-PENTANE,2. 3-DI-ME-HEXANE,2-ME-3-ETH-PENTANE,2- ME-
      HEPTANE,4-ME-HEPTANE,3. 4-DI-ME-HEXANE
1880  DATA 3-ME-HEPTANE,3-ETH-HEXANE,2. 2. 4. 4-TETRA-ME-PENTANE,3-ME-3-ETH-PEN-
      TANE,2. 2. 5-TRI-ME-HEXANE,2. 2. 4-TRI-ME-HEXANE,N-OCTANE,2. 4. 4-TRI-ME-HEX-
      ANE,2. 3. 5-TRI-ME-HEXANE,2. 2-DI-ME-HEPTANE
1890  DATA 2. 2. 3. 4-TETRA-ME-PENTANE,2. 4-DI-ME-HEPTANE,2. 2. 3-TRI-ME-HEXANE,2. 2-
      DI-ME-3-ETH-PENTANE, 2-ME-4-ETH-HEXANE, 2. 6-DI-ME-HEPTANE, 4. 4-DI-ME-HEP-
      TANE,2. 5-DI-ME-HEPTANE,3. 5-DI-ME-HEPTANE,3. 3-DI-ME-HEPTANE
1900  DATA 2. 4-DI-ME-3-ETH-PENTANE,2. 3. 3-TRI-ME-HEXANE,2-ME-3-ETH- HEXANE,2. 3. 4-
      TRI-ME-HEXANE, 2. 2. 3. 3-TETRA-ME-PENTANE, 3. 3. 4-TRI-ME-HEXANE, 3-ME-3-ETH-
      HEXANE,3-ME-4-ETH-HEXANE,2. 3-DI-ME-HEPTANE,4-ETH-HEPTANE
1910  DATA 3. 4-DI-ME-HEPTANE, 2. 3. 3. 4-TETRA-ME-PENTANE, 4-ME-OCTANE, 2-ME-OC-
      TANE,3-ETH-HEPTANE,3-ME-OCTANE,2. 3-DI-ME-3-ETH-PENTANE,N-NONANE,2. 2-DI-
      ME-PROPANE
1920  DATA CYCLOPROPANE,1-TR-2-DI-ME-CYCLOPROPANE,ETH-CYCLOPROPANE,1-CI- 2-
      DI-ME-CYCLOPROPANE, 1. 1. 2-TRI-ME-CYCLOPROPANE, CYCLOPENTANE, ISO-PROP-
      CYCLOPROPANE,ETH-CYCLOBUTANE,1. 1. 2. 2-TETRA-ME-CYCLOPROPANE
1930  DATA ME- CYCLOPENTANE,1. 1-DI-ME-CYCLOPENTANE,1-CI-2-DI-ME-CYCLOPENTANE,
      1-TR-2-DI-ME-CYCLOPENTANE, 1-CI-3-DI-ME-CYCLOPENTANE, 1-TR-3-DI-ME-CYCLOPE-
      NTANE,N-PROPYCY CLOPENTANE,ISO-PROPY-CYCLOPENTANE,1-ME-1-ETH-CYCLOPE-
      NTANE
```

```
1940 DATA 1-ME-CI-2-ETH-CYCLOPENTANE, 1-ME-TR-2-ETH-CYCLOPENTANE, 1-ME-CI-3-
     ETH-CYCLOPENTANE, 1-ME-TR-3-ETH-CYCLOPENTANE, 1-ETH-CI-2-ME-CYCLOPEN-
     TANE,1-ETH-TR-2-ME-CYCLOPENTANE,1-ETH-CI-3-ME-CYCLOPENTANE
1950 DATA 1-ETH-TR-3-ME-CYCLOPENTANE,1.1.2-TRI-ME-CYCLOPENTANE,1.1.3-TRI-ME-
     CYCLOPENTANE,1-CI-2-CI-3-TRI-ME-CYCLOPENTANE,1-CI-2-TR-3-TRI-ME-CYCLOPEN-
     TANE,1-TR-2-CI-3-TRI-ME-CYCLOPENTANE,1-CI-2-CI-4-TRI-ME-CYCLOPENTANE
1960 DATA 1-CI-2-TR-4-TRI-ME-CYCLOPENTANE,1-TR-2-CI-4-TRI-ME-CYCLOPENTANE,ETH-
     CYCLOPENTANE,CYCLOHEXANE,ME-CYCLOHEXANE,ETH-CYCLOHEXANE,1.1-DI-ME-
     CYCLOHEXANE,1-CI-2-DI-ME-CYCLOHEXANE,1-TR-2-DI-ME-CYCLOHEXANE,1-CI-3-DI-
     ME-CYCLOHEXANE
1970 DATA 1-TR-3-DI-ME-CYCLOHEXANE,1-CI-4-DI-ME-CYCLOHEXANE,1-TR-4-DI-ME-CY-
     CLOHEXANE,1.1.2-TRI-ME-CYCLOHEXANE,1.1.3-TRI-ME-CYCLOHEXANE
1980 DATA BUTENE-1,BUTADIENE-1.3,TR-BUTENE-2,CI-BUTENE-2,BUTADIENE-1.2,CY-
     CLOBUTENE,3-ME-BUTENE-1,2-ME-BUTENE-1-IN-3,PENTADIENE-1.4,PENTENE-1
1990 DATA 2-ME-BUTENE-1,ISOPRENE,TR-PENTENE-2,CI-PENTENE-2,3.3-DI-ME-BUTENE-1,
     3-ME-BUTADIENE-1.2,2-ME-BUTENE-2,PENTADIENE-1-TR-3,CYCLOPENTADIENE-1.3,
     PENTADIENE-1-CI-3
2000 DATA PENTADIENE-1.2,PENTADIENE-2.3,3-ME-PENTADIENE-1.4,CYCLOPENTENE,4-
     ME-PENTENE-1,3-ME-PENTENE-1,4-ME-CI-PENTENE-2,2.3-DI-ME-BUTENE-1,4-ME-TR-
     PENTENE-2,HEXADIENE-1.5
2010 DATA 2-ME-PENTENE-1,HEXENE-1,HEXADIENE-1-TR-4,HEXADIENE-1-CI-4,TR-HEX-
     ENE-3,2-ETH-BUTENE-1,CI-HEXENE-3,TR-HEXENE-2,2-ME-PENTENE-2,2-ETH-BUTA-
     DIENE-1.3
2020 DATA 2-ME-PENTADIENE-1-CI-3,3-ME-CYCLOPENTENE,3-ME-CI-PENTENE-2,4.4-DI-ME-
     PENTENE-1,CI-HEXENE-2,2.3-DI-ME-BUTADIENE-1.3,HEXADIENE-1-TR-3,3-ME-TR-
     PENTENE-2,4.4-DI-ME-TR-PENTENE-2,2-ME-CYCLOPENTADIENE-1.3
2030 DATA HEXADIENE-1-CI-3,1-ME-CYCLOPENTADIENE-1.3,3.3-DI-ME-PENTENE-1,2.3-DI-
     ME-BUTENE-2,BUTYNE-2,PENTYNE-1,PENTYNE-2,4-ME-PENTYNE-1,HEXYNE-1,
     HEXYNE-3
2040 DATA HEXYNE-2,5-ME-HEXYNE-1,HEPTADIYNE-1.6,HEPTYNE-1,HEPTYNE-3,HEP-
     TYNE-2,BENZENE,TOLUENE,ETH-BENZENE,P-XYLOL
2050 DATA M-XYLOL,O-XYLOL
2060 DATA HEPTENE-1,OCTENE-1,1-CI-3-CI-5-TRI-ME-CYCLOHEXANE,1-TR-2-TR-4-TRI-ME-
     CYCLOHEXANE,1-CI-3-TR-5-TRI-ME-CYCLOHEXANE,1-TR-2-CI-4-TRI-ME-CYCLOHEX-
     ANE,1-TR-2-CI-3-TRI-ME-CYCLOHEXANE,1-CI-2-CI-4-TRI-ME-CYCLOHEXANE
2070 DATA 1-CI-2-TR-4-TRI-ME-CYCLOHEXANE,1-ME-CI-3-ETH-CYCLOHEXANE,1-ME-TR-4-
     ETH-CYCLOHEXANE,1-CI-2-TR-3-TRI-ME-CYCLOHEXANE,1-CI-2-CI-3-TRI-ME-CYCLO-
     HEXANE
2080 DATA 1-ME-TR-2-ETH-CYCLOHEXANE,1-ME-TR-3-ETH-CYCLOHEXANE,3.3-DI-ETH-
     PENTANE
2090 DATA 2.2.3-TRI-ME-BUTENE-1,4.4-DI-ME-PENTENE-2,3.4-DI-ME-PENTENE-1,2.4-DI-
     ME-PENTENE-1,2.4-DI-ME-PENTENE-2,1-ME-CYCLOPENTENE,3-ME-HEXENE-1,3-ETH-
     PENTENE-1,2-ME-TRI-HEXENE-3,5-ME-HEXENE-1
2100 DATA 2.3-DI-ME-PENTENE-1,4-ME-CI-HEXENE-2,4-ME-TRI-HEXENE-2,4-ME-HEXENE-1,
```

```
      3-ME-2ETH-BUTENE-1,5-ME-TR-HEXENE-2,2-ME-HEXENE-1,3. 4-DI-ME-TR-PENTENE-2,
      2-ETH-PENTENE-1
2110  DATA 3-ME-CI-HEXENE-3, TR-HEPTENE-3, CI-HEPTENE-3, 2-ME-HEXENE-2, 3-ME-TR-
      HEXENE-3, 2. 2-DI-ME-TR-HEXENE-3, 3-ME-CI-HEXENE-2, 2. 5-DI-ME-TR-HEXENE-3, 3-
      ETH-PENTENE-2,TR-HEPTENE-2
2120  DATA 2. 3-DI-ME-PENTENE-2, 2. 4. 4-TRI-ME-PENTEN-1, 3-ETH-CYCLOPENTENE, 2. 4. 4-
      TRI-ME-PENTENE-2, 2. 2-DI-ME-CI-HEXENE-3, 2. 2. 3-TRI-ME-PENTENE-1, 2-ME-3-ETH-
      PENTENE-1,2. 3-DI-ME-HEXENE-1,2-ME-TR-HEPTENE-3,3. 4. 4-TRI-ME-CI-PENTENE-2
2130  DATA 2. 5-DI-ME-HEXENE-2, 2. 3. 4-TRI-ME-PENTENE-2, 2-ME-3-ETH-PENTENE-2, TR-
      OCTENE-4,2. 3-DI-ME-HEXENE-2,TR-OCTENE-2
2140  DATA 475. 3,. 007,500,0,536. 8,. 082,567. 3,. 077,569. 7,. 017,584. 2,. 045,600,0,625. 6,. 065,
      629. 8,. 035,639. 7,. 144
2150  DATA 658. 9,. 132,666. 6,. 017,671. 7,. 085,676. 2,. 036,686,. 057,689. 9,. 109,700,0,719. 4,. 052,
      726. 7,. 26,728. 4,. 03
2160  DATA 731. 9,. 051,737. 1,. 152,743. 8,. 122,752. 4,. 138,759. 4,. 202,760. 1,. 072,761. 4,. 107,
      764. 9,. 015,767. 2,. 026,770. 6,. 099
2170  DATA 772. 3,. 031,772. 7,. 055,772. 7,. 187,774,. 189,776. 3,. 062,789. 1,. 132,800,0,807. 7,. 157,
      812,. 084,815. 4,. 051
2180  DATA 819. 6,. 218,821. 5,. 02,821. 6,. 138,822,2,. 2,824. 3,. 055,827. 2,. 025,827. 6,. 115,832. 9,
      . 03,833. 7,. 055,835. 8,. 11
2190  DATA 836. 5,. 171,840,. 185,843. 7,. 105,849. 1,. 146,852. 1,. 272,853. 1,. 22,853. 5,. 175,854. 8,
      . 155,854. 8,. 065,857. 5,. 045
2200  DATA 858. 4,. 0925,858,. 257,863,. 03,864. 7,. 015,866. 9,. 0425,870. 2,. 03,872. 3,. 27,900,0,
      412. 3,. 03
2210  DATA 344. 1,. 05,479. 2,. 028,510. 2,. 066,514. 9,. 057,549. 2,. 054,565. 7,. 138,572. 7,. 124,
      621. 1,. 122,619. 9,. 095
2220  DATA 627. 9,. 152,673. 5,. 183,720. 9,. 209,689. 2,. 159,682. 7,. 163,686. 8,. 165,830. 3,. 184,
      812. 1,. 247,794. 7,. 25
2230  DATA 821,. 253,790. 9,. 218,790. 3,. 192,790. 2,. 17,821. 4,. 248,791. 6,. 19,788. 3,. 183,790. 7,
      . 2,763. 2,. 232,723. 6,. 191,802. 2,. 275
2240  DATA 779. 5,. 208,747. 8,. 165,776. 2,. 21,773. 1,. 218,741. 1,. 169,733. 8,. 183,662. 7,. 222,
      725. 8,. 243,834. 3,. 269,787,. 291
2250  DATA 829. 3,. 307,801. 8,. 287,785,. 242,805. 6,. 261,805. 2,. 267,785. 9,. 275,883. 7,. 38,840. 4,
      . 282
2260  DATA 384. 4,. 0085,385. 6,. 012,406,6,-. 015,416. 9,. 017,429. 5,. 005,432. 6,. 041,450. 3,. 025,
      465. 74,. 01,464. 2,. 041,481. 8,. 017
2270  DATA 488,. 005,498. 2,. 08,500. 6,-. 025,504. 9,. 01,506. 8,. 065,510. 3,-. 02,514. 3,. 003,515. 8,
      . 035,523,. 19,525. 7,. 08
2280  DATA 525. 6,. 016,530. 2,-. 032,532. 4,. 068,549. 5,. 128,549. 4,. 05,551. 4,. 079,556. 2,. 024,
      558. 8,. 043,561. 9,-. 013,562. 9,. 04
2290  DATA 580. 1,. 022,582. 3,. 021,583,. 005,588. 5,. 032,592. 1,-. 022,592,. 005,592. 6,. 019,
      596. 9,-. 007,597. 8,-. 011,599. 3,. 032
2300  DATA 601. 1,. 031,603. 2,. 143,602. 8,. 033,604. 6,. 094,603. 6,. 025,611. 3,. 037,613. 6,. 047,
      612. 7,. 008,614. 7,-. 008,624. 4,. 149
```

```
2310 DATA 621.8,-.032,626.1,.139,626.2,.117,625.1,.026,463.1,-.007,484.2,.005,548.5-.041,
     522.2,.021,586,.02,627.9,-.08
2320 DATA 644.2,-.041,654.8,.051,663.6,.002,686.4,-.003,721.6,-.08,746.2,-.027,636.8,.24,
     744.2,.24,833.7,.253,848.4,.251
2330 DATA 850.4,.236,868.8,.272
2340 DATA 681.8,.025,781.2,.028,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,877.2,
     .262
2350 DATA 628.5,.112,635.5,.105,636.9,.112,637.7,.065,640.6,-.03,644.5,.165,644.7,.068,
     646.9,.101,647.1,-.019,650,.044,650.4,.099,654,9,.06,656.7,.038,657.9,.063,659.1,.04,
     659.5,.015,678.1,.023,678.3,.029,681.8,.025
2360 DATA 684.6,.02,687.5,-.006,690.4,.034,691.2,.002,691.2,-.009,692.8,-.02,693.3,.045,
     695.1,-.021,697.2,.03,698.4,.001,703.4,.038,704.3,.015,712.4,.171,715.4,.044,716.8,.
     103,734.6,.189,735,.118,739.3,.081,741.1,.003,747.1,.084
2370 DATA 719.9,.034,765.9,.041,778.4,.082,783.6,.014,788.8,.072,797.7,0
2380 DATA 474.4,.01,500,0,536.2,.09,565.5,.175,568.8,.01,583.6,.035,600,0,624.5,.07,630.3,.
     055,636.7,.165,655.9,.16,667.2,.01,669.6,.09,676,.035,686,.03,0,0,700,0,723.4,.055,0,0,
     731.5,.035
2390 DATA 733.6,9.000001E-02,734.27,.156,741,.11,753,5,.215,749.4,.16,759.9,.08,760.9,.135,
     766,.02,767.3,.03,768.8,.115.773.3,.03,773.3,.03,0,0,0,0,783.9,.06,790.7,.115,800,0,
     807.2,.13,812.9,1.45,818.9,.045
2400 DATA 0,0,822.6,.05.822.6,.05,0,0,825.1,.17,829.5,.025,0,0,835.8,.045,837.3,.065,
     839.1,.045,0,0,840.4,.03,845.8,.18,847.1,.29,0,0,845.8,.18,0,0,856,.2,856,.2,0,0
2410 DATA 859.4,.105,0,0,864.1,.055,865.1,.005,868.3,.12,871.6,.01,0,0,900,0,0,0,0,0,0,0,0,
     0,0,0,0,0,565.5,.17,0,0,0,0,0,0,628.2,.16
2420 DATA 673.2,.175,721.1,.26,688.6,.175,683.2,.17,686,.175,827.6,.185,807.2,.26,790.7,
     .25,816.3,.275,788.7,.215,785.4,.205,787.4,.215,0,0,0,0,0,0,0,0,760.9,.27,723.4,.135,
     800,.175,773.3,.35
2430 DATA 746.8,.17,771.7,.11,766,.255,739.8,.17,731.5,.195,660.7,.23,721.1,.26,827.6,.285,
     781.9,.315,822.6,.37,793.5,.325,775,.265,800,.295,800,.295,776.8,.270,874.1,.37,823.8,
     .29,0,0,0,0,0,0
2440 DATA 0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0
2450 DATA 0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,588.86,.002,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,
     0,0
2460 DATA 0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,
     0,0
2470 DATA 0,0,0,0,0,0,651.2,.2,753.5,.215,844.6,.24,854.3,.165,853.4,.21,874.1,.27
2480 DATA 688.71,0,788.24,-.005,832.8,.29.847.1,.295,850.9,.255,868.3,.325,870.1,.255,
     872.3,.36.875.5,.3,883.3,.165.885.9,.145,894.1,.295,895.7,.37,897.4,.375,897.4,.375,0,0
2490 DATA 0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,
     0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,
     0,0,0,0,0,0,0
2500 DATA 475.2,.028,500,0,536.9,.084,568.5,.084,569.6,.02,585.3,.048,600,0,625.7,.065,
     629.9,.032,641.9,.159.660.6,.141,666.9,.013,673.9,9.399999E-02,677,4,.035,688.9,.055,
     690.6,6.800001E 02,700,0,720.7,.047,0,0,729.5,.01
```

```
2510  DATA 733.5,.053,740.7,.164,745.2,.129,756.3,.146,763.6,.218,762.8,.072,0,0,756.1,.013,
      768.6,.003,773.9,.104,774,.029,0,0,0,0,777.5,.203,778.7,.051,791.3,.138,800,0,810.1,
      .166,815.4,.081,816.7,.044
2520  DATA 826,.231,0,0,826.3,.139,826.8,.21,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,839.1,.109,841.7,.183,0,0,
      0,0,854.8,.156,860.6,.29,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0
2530  DATA 0,0,865.7,.278,0,0,0,0,0,0,871.7,.028,839.1,.109,900,0,412.4,.102,0,0,0,0,0,0,
      546.9,.037,0,0,583.2,.147,0,0,634.7,.123,0,0,641.4,.188
2540  DATA 685.9,.187,734.6,.212,699.7,.152,0,0,0,0,843.2,.193,823.4,.264,0,0,834,.24,0,0,0,
      0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,773.4,.026,731.3,.19,812.8,.288,0,0
2550  DATA 755.4,.167,0,0,781.7,.223,746.5,.178,746.9,.196,677,.234,736.3,.257,845.7,.278,
      799,.252,842.2,.255,810.2,.307,791.6,.255,817.8,.26,816.8,.272,0,0,0,0,850.2,.286,0,0,
      0,0,440.9,-.034
2560  DATA 454.5,.011,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,515.5,.003,525.2,-.015,0,0,535.1,-.041,542.2,
      -.009,536.7,.039,581.3,-.073,551.5,-.019,595.6,-.024,0,0,0,0,598.5,-.062,603.5,-.072,0,0
2570  DATA 596.1,0,581.3,.03,582.1,.063,589.1,-.002,593.7,.026,593.5,-.043,631.4,.017,
      616.7,.002,616.9,.009,0,0,0,0,625,-.052,628,-.009,627.2,.008,630.4,-.063,634.5,.038,0,0,
      0,0,646.3,.12,640,.03
2580  DATA 634.8,.076,640.1,.007,0,0,0,0,649.4,-.015,662.8,.1,0,0,0,0,0,0,656,.106,663.4,0,
      0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0
2590  DATA 0,0,0,0,0,0,775.6,.19,876.8,.215,0,0,0,0,0,0,0,0,816.8,.011,0,0
2600  DATA 0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,882.5,.286
2610  DATA 645.6,-.036,668,.085,667.1,.101,671.9,0,674.8,-.063,689.3,.093,675.6,.055,676,
      .092,676.8,-.055,685.1,.024,684.2,.075,686.5,.046,684.2,.145,691.2,.052,692.3,.022,0,0,
      715.3,.004,712.9,-.001,716.6,.006,717.2,.008
2620  DATA 726.4,-.036,719.3,-.032,724.7,.012,727.2,-.025,720.7,-.01,720.7,-.057,729.4,.023,
      720.6,-.054,733.4,.002,732.1,-.022,741.4,.02,736,.117,754.9,.166,749.7,.013,746.9,.083,
      768.3,.183,766.2,.103,773.2,.067,769.4,.03,782,.053
2630  DATA 783.8,-.002,802.2,.005,765.5,.109,814.3,-.012,825.9,.025,831.9,-.024
```

【程序 12-4】 气相色谱程序升温保留时间预测程序

```
10  KEY OFF
20  SCREEN 1
30  COLOR 1,7
40  CLS
50  LOCATE 4,5
60  PRINT"本程序用于预测气相色谱程序升温保留时间"
70  FOR I=0 TO 1500
80  NEXT I
90  CLS
100  COLOR 1,4
110  DEF FNT(X)=60*INT(X)+100*(X-INT(X))
120  DIM A(100),B(100),T(100),N￥(30,100),M￥(3)
130  PRINT TAB(5);"死时间 t0 可表示为:"
140  PRINT TAB(8);"t0=a(1-b*sqr(T))/P"
150  PRINT"其中 T 为绝对温度,P 为柱压降,a,b 为常数.";
```

```
160  PRINT TAB(5);"请给我在不同柱温,柱前压(Pa)以及";
170  PRINT "测定的死时间(t0)数据.";
180  PRINT TAB(8);"数据输完后请键入(O,O,O)"
190  FOR I=0 TO 100
200  PRINT,
210  INPUT A,T(I),B(I)
220  B(I)=FNT(B(I))
230  IF B(I)=0 GOTO 270
240  A(I)=A+273.16
250  N=N+1
260  NEXT I
270  FOR I=0 TO N-1
280  A1=A1+1/T(I)^2
290  B1=B1+SQR(A(I))/T(I)^2
300  C1=C1+B(I)/T(I)
310  D1=D1+A(I)/T(I)^2
320  E1=E1+SQR(A(I))*B(I)/T(I)
330  NEXT I
340  B=(A1*E1—C1*B1)/(A1*D1—B1*B1)
350  A=(C1*D1—E1*B1)/(A1*D1—B1*B1)
360  N=0
370  CLS
380  COLOR 4,1
390  PRINT TAB(5);"请给我化合物的名字以及保留值方程:";
400  PRINT TAB(8);"lnk=a+b/T"
410  PRINT "的系数 a 及 b."
420  PRINT TAB(5);"数据输完后请键入(O,O,O)"
430  FOR I=0 TO 100
440  PRINT TAB(5);I+1;
450  INPUT N¥(30,I),A(I),B(I)
460  IF B(I)=0 GOTO 490
470  N=N+1
480  NEXT I
490  CLS
500  PRINT TAB(5);"初始温度及恒温时间;"
510  INPUT T0,T5
520  T5=FNT(T5)
530  T0=T0+273.16
540  PRINT TAB(5);"升温速率(℃/min)";
550  INPUT C
560  C=C/60
570  PRINT TAB(5);"终温";
580  INPUT T1
590  PRINT TAB(5);"延迟时间";
```

```
600  INPUT A9
610  A9=FNT(A9)
620  T5=T5+A9
630  T1=T1+273.16
640  PRINT TAB(5);"载气压力(Pa)";
650  INPUT P
660  P1  (P/1.03+1)^2
670  P2=P1-1
680  A0=1.333333*(P1*(P/1.03+1)-1)*P/(P1-1)
690  A1  A-B*SQR(T0)
700  A2=A-B*SQR(T1)
710  FOR I=0 TO N-1
720  X=0
730  K1=EXP(A(I)-B(I)/T0)+1
740  K2  EXP(A(I)+B(I)/T1)-1
750  TC=TO
760  FOR J  0 TO 7200 STEP 2
770  IF J<T5 GOTO 790
780  IF J>=T5 AND TC<T1 GOTO 820 ELSE GOTO 850
790  K=K1
800  B1=A1
810  GOTO 870
820  TC=TO+C*(J-T5)
830  K=EXP (A(I)+B(I)/TC)+1;B1  A-SQR(TC)*B
840  GOTO 870
850  K=K2
860  B1=A2
870  X=X+A0/B1/K/SQR(P1-X*P2)
880  T(I)=J
890  IF X>=1 GOTO 950
900  NEXT J
910  BEEP
920  CLS
930  PRINT TAB(8);"保留时间太长,请改变条件再算."
940  GOTO 500
950  NEXT I
960  FOR I=0 TO N-2
970  FOR J=I+1 TO N-1
980  IF T(J)>T(I) THEN 1030
990  SWAP T(I),T(J)
1000  SWAP N¥(30,I),N¥(30,J)
1010  SWAP A(I),A(J)
1020  SWAP B(I),B(J)
1030  NEXT J,I
```

```
1040  BEEP
1050  CLS
1060  PRINT TAB(5);"分析条件:"
1070  T5  T5－A9
1080  A3  INT(T5/60)
1090  B3＝T5－60×A3
1100  PRINT TAB(8);"初 温:";INT(10×(TO－273.16)+.5)/10;"C"
1110  PRINT TAB(8);"恒 温 时 间:";A3;"'";B3;"''"
1120  PRINT TAB(8);"升 温 速 率:";60×C;"C/min"
1130  PRINT TAB(8);"终 温:";INT(10*(T1－273.16)－.5)/10;"C"
1140  PRINT TAB(8);"延 迟 时 间:";A9;"''"
1150  PRINT TAB(8);"载 气 压 力:";P;"Pa"
1160  PRINT "编 号";TAB(10);"组 分";TAB(20);"保 留 时 间"
1170  FOR I  0 TO N－1
1180  A3  INT(T(I)/60)
1190  B3  T(I)－60*A3
1200  PRINT TAB(3);I－1;TAB(10);N¥(30,I);TAB(20);A3;"'";B3;"''"
1210  FOR J  0 TO 319 STEP 3:PSET(J,199):NEXT J
1220  MY＝INKEY¥
1230  IF MY＝" "GOTO 1220
1240  NEXT I
1250  PRINT TAB(5);"是否需改换条件再试(回答 Y 或 N)";
1260  M¥＝INKEY¥
1270  DEF SEG:POKE 106,0
1280  IF M¥－"Y" OR M¥＝"y" GOTO 490
1290  IF MY＝"N" OR M¥＝"n" GOTO 1300 ELSE GOTO 1260
1300  KEY ON
1310  END
```

【程序 12-5】 计算 van Deemter 方程($H=A/u+B+C*u$)或 Golay 方程($H=A/u+C*u$)的系数

```
10  CLS
20  KEY OFF
30  SCREEN 1,0
40  COLOR 9,4
50  LOCATE 3,5
60  PRINT"色谱过程中,柱效率与流动相线速有关.对";
70  PRINT"于气相色谱,柱效率通常可用 van Deem";
80  PRINT"ter 方程或 Golay 方程描述.本程序用";
90  PRINT"于塔板高度方程 H=A/u+B+Cu,H  A/u+Cu 中系数 A,B,C 的计算."
100  LOCATE 8,1
110  FOR I  1 TO 320 STEP 3
120  PSET (I,199)
130  NEXT
140  JJ¥  INKEY¥
```

```
150  IF JJ¥="" GOTO 140 ELSE GOTO 160
160  CLS
170  PRINT TAB(3);"柱管是1,填充柱还是2.毛细管柱"
180  PRINT TAB(8);"(回答1或2)"
190  PRINT TAB(14);
200  INPUT A1
210  PRINT TAB(7);
220  INPUT"柱管名";B¥
230  PRINT TAB(7)
240  INPUT"柱温";T
250  PRINT TAB(7);"组分";
260  INPUT D¥
270  PRINT TAB(5);
280  INPUT "输入数据为 (1)塔板数,(2)塔板高度 (回答1或2)";B1
290  PRINT TAB(7);
300  INPUT"柱长 (M)";L
310  DIM N(1000),H(1000),U(1000)
320  CLS
330  COLOR 6,15
340  IF B1=1 GOTO 370
350  PRINT TAB(7);"板高";
360  GOTO 380
370  PRINT TAB(7);"板数";
380  PRINT"以及载气线速(CM/S)"
390  PRINT TAB(7);"(数据完结请键入O,O)"
400  FOR I=1 TO 1000
410  PRINT TAB(7);N+1;
420  N=N+1
430  ON B1 GOTO 440,480
440  INPUT N(I),U(I)
450  IF U(I)=0 GOTO 530
460  H(I)=1000*L/N(I)
470  GOTO 510
480  INPUT H(I),U(I)
490  IF U(I)=0 GOTO 530
500  N(I)=1000*L/H(I)
510  U(I)=10*U(I)
520  NEXT I
530  N=N-1
540  FOR I=1 TO N
550  A=A+1/U(I)
560  B=B+H(I)/U(I)
570  C=C+U(I)^2
580  D=D+H(I)*U(I)
```

```
590  E=E+1/U(I)^2
600  F=F−U(I)
610  G=G+H(I)
620  NEXT I
630  ON A1 GOTO 690,640
640  Z=E*C−N^2
650  K1=(C*B−N*D)/Z
660  K2=(E*D−B*N)/Z
670  K3=0
680  GOTO 730
690  Z=N*(C*E−2*A*F)−C*A^2−E*F^2−N^3
700  K1=(B*C*N−D*A*F+G*N*F−C*G*A−B*F^2−D*N*N)/Z
710  K2=(E*D*N+N*G*A+A*B*F−D*A*A−E*G*F−B*N*N)/Z
720  K3=(E*C*G+B*N*F+A*N*D−A*B*C−E*D*F−G*N*N)/Z
730  CLS
740  COLOR 4,15
750  BEEP
760  CLS
770  COLOR 8,15
780  LOCATE 1,2
790  PRINT" 4.0  H"
800  LOCATE 5,2
810  PRINT "2.0"
820  LOCATE 9,6
830  PRINT" 0 10 20 30 U";
840  LINE(40,0)−(40,144)
850  LINE(40,144)−(320,144)
860  FOR I=1 TO 40
870  PSET(40+7*I,143)
880  NEXT
890  FOR I=1 TO 40
900  PSET(40+70*I,142)
910  PSET(40+70*I,141)
920  NEXT
930  FOR I=0 TO 40
940  PSET (41,3.5*I+4)
950  NEXT
960  PSET(42,4)
970  PSET(42,39)
980  PSET(42,74)
990  PSET(42,109)
1000  PSET(43,4)
1010  PSET(43,39)
1020  PSET(43,74)
```

```
1030  PSET(43,109)
1040  DIM BALL(28),X(100),Y(100)
1050  F=0
1060  LINE(155,100)-(165,100)
1070  LINE(160,96)-(160,101)
1080  X=155
1090  Y  96
1100  GET(X,Y)-(X+10,Y-8),BALL
1110  FOR I=1 TO 280
1120  A=K1/I*.7+10*K2*I/7+K3
1130  A=144-35*A
1140  IF A<=0 GOTO 1180
1150  IF I=1 GOTO 1170
1160  LINE(39+I,B)-(40+I,A)
1170  B A
1180  NEXT
1190  GOSUB 1210
1200  GOTO 1190
1210  GOSUB 1270
1220  PUT(X.OLD,Y.OLD),BALL
1230  PUT(X,Y),BALL
1240  IF I=82 THEN X0=X
1250  Y0=Y
1260  RETURN
1270  I¥=INKEY¥
1280  IF I¥="f" OR I¥="F" THEN RR=5
1290  IF I¥="S" OR I¥="s" THEN RR=1
1300  IF I¥="R" OR I¥="r" GOTO 1530
1310  IF I¥  "t" OR I¥="T" GOTO 1320 ELSE 1350
1320  F F+1
1330  X(F)=X-5
1340  X(F)  Y-4
1350  I=VAL(I¥)
1360  IF LEN(I¥)><2 THEN 1270
1370  X.OLD=X
1380  Y.OLD  Y
1390  I=ASC(RIGHT¥(I¥,1))
1400  IF I>70 AND I<74 THEN Y=Y-RR
1410  IF I>78 AND I<82 THEN Y=Y+RR
1420  IF I=71 OR I=75 OR I=79 THEN X=X-RR
1430  IF I=73 OR I=77 OR I=81 THEN X=X+RR
1440  IF X>310 THEN X  320
1450  IF X<1 THEN X=1
1460  IF Y>190 THEN Y  190
```

```
1470  IF Y<1 THEN Y=1
1480  LOCATE 25,1
1490  PRINT"            ";
1500  LOCATE 25,1
1510  PRINT"U=";CINT(10*(X/7-5))/10,"H= ";CINT(100*(4-Y/35))/100;
1520  RETURN
1530  CLS
1540  COLOR 4,15
1550  PRINT TAB(5);"塔板高度与载气线速的关系"
1560  PRINT TAB(3);"H =";INT(100*K1+.5)/100;"/u+";INT(10000*K2+.5)/10000!;"u";
1570  IF A1=1 THEN PRINT" +";INT(100*K3 -5)/100
1580  PRINT TAB(5);"柱长:";L;"M"
1590  PRINT TAB(5);"柱温:";T;"C";
1600  PRINT TAB(5);"柱管:";B¥
1610  PRINT TAB(5);"组分:";D¥
1620  PRINT "H min=";CINT(200*SQR(K1*K2)+100*K3)/100;"mm"
1630  PRINT "n max= ";100*CINT(10*L/(K3+2*SQR(K1*K2)))
1640  PRINT "u opt =;"CINT(SQR((K1/K2))/10;"cm/sec"
1650  FOR I=1 TO 320 STEP 3
1660  PSET (I,199)
1670  NEXT
1680  JJ¥ INKEY¥
1690  IF JJ¥="" GOTO 1680
1700  PRINT "u(cm/s)";TAB(15);"He";TAB(25);"Hc";TAB(35);"偏差"
1710  D=0
1720  E=0
1730  FOR I=1 TO N-1
1740  FOR J=I+1 TO N
1750  IF U(I)<U(J) GOTO 1780
1760  SWAP U(I),U(J)
1770  SWAP H(I),H(J)
1780  NEXT J,I
1790  FOR I=1 TO N
1800  A=K1/U(I)+K2*U(I)+K3
1810  A=CINT(100*A)/100
1820  H=CINT(100*H(I))/100
1830  B=CINT(100*(A-H)/100
1840  D=D+ABS(B)
1850  E=E+B*B
1860  PRINT TAB(2);U(I)/10;TAB(14);H;TAB(24);A;TAB(34);B
1870  FOR J=1 TO 320 STEP 3
1880  PSET (J,199)
1890  NEXT
1900  YY¥=INKEY¥
```

```
1910  IF YY¥=""GOTO 1900
1920  NEXT I
1930  PRINT"均方差  ";INT(100*SQR(E/N)+.5)/100;"平均偏差=";INT(100*D/N-.5)/100
1940  V=CSRLIN
1950  INPUT U
1960  U  10*U
1970  A=K1/U+K2*U+K3
1980  A=CINT(100*A)/100
1990  LOCATE V,24
2000  PRINT A
2010  GOTO 1940
```

【程序 12-6】 计算半峰宽与保留时间的关系($W_{1/2}=a+b^{*}t_R$)中的系数

```
10  CLS
20  SCREEN 1
30  COLOR 5,15
40  LOCATE 2
50  KEY OFF
51   PRINT TAB(5);"色谱峰的半峰宽与保留时间有关,一般情";
52   PRINT" 情况下可近似认为:"
70  PRINT TAB(9);"半峰宽=a+b*tR"
71   PRINT TAB(5);"本程序用于计算半峰宽方程中的系数,塔";
80  PRINT "板高度以及塔板高度变异系数."
90  FOR I=1 TO 320 STEP 3
100  LOCATE 1,1,1
110  PSET(I,199)
120  NEXT
130  JJ¥=INKEY¥
140  IF JJ¥=""GOTO 130
150  CLS
160  COLOR 9,1
170  DIM A(1000),T(1000),M(1000)
180  PRINT TAB(5);"请给出记录器纸速(mm/min)";
190  INPUT V
200  PRINT TAB(5);"以及死时间";
210  INPUT TO
220  PRINT TAB(5);"柱长(m)";
230  INPUT L
240  CLS
250  COLOR 1,4
260  PRINT TAB(5);"请给出用读数显微镜测量的半峰宽(mm)与";
265   PRINT "与保留时间数据:"
270  PRINT TAB(7);"(数据结束请键入 0,0)"
280  FOR I=1 TO 1000
290  PRINT TAB(7);I;
```

```
300  INPUT A,T
310  IF A=0 GOTO 370
320  N=N+1
330  A(I)=A/V
340  T(I)=INT(T)+(T-INT(T))/.6
350  M(I)=T
360  NEXT I
370  FOR I=1 TO N
380  A=A+T(I)
390  B=B+A(I)
400  C=C+T(I)^2
410  D=D+A(I)*T(I)
420  NEXT I
430  Z=N*C-A*A
440  K1=(B*C-A*D)/Z*60
450  K2=(N*D-A*B)/Z
460  CLS
470  COLOR 8,15
480  LOCATE 1,1,1
490  PRINT;"半峰宽(s)";
500  LOCATE 3,2,1
510  PRINT;"30";
520  LOCATE 5,2,1
530  PRINT;"20";
540  LOCATE 7,2,1
550  PRINT ;"10";
560  LOCATE 9,5,1
570  PRINT"0          10          20          30 tR(min)";
580  LOCATE 25,1,1
590  LINE(40,0)-(40,144)
600  LINE(40,144)-(320,144)
610  FOR I=1 TO 40
620  PSET(40+7*I,143)
630  NEXT
640  FOR I=1 TO 4
650  PSET(40+70*I,142)
660  PSET(40+70*I,141)
670  NEXT
680  FOR I=0 TO 40
690  PSET (41,3.5*I+4)
700  NEXT
710  PSET (42,4)
720  PSET (42,39)
730  PSET (42,74)
```

```
740  PSET (42,109)
750  PSET (43,4)
760  PSET (43,39)
770  PSET (43,74)
780  PSET (43,109)
790  DIM BALL (28)
800  F=0
810  LINE (155,100)-(165,100)
820  LINE (160,96)-(160,104)
830  X=155
840  Y=96
850  GET (X,Y)-(X+10,Y+8),BALL
860  FOR I=1 TO 280
870  A=K1/60+K2*1/7
880  A=144-210*A
890  IF A<=0 GOTO 930
900  IF I=1 GOTO 920
910  LINE (39+I,B)-(40+I,A)
920  B=A
930  NEXT
940  GOSUB 960
950  GOTO 940
960  GOSUB 1020
970  PUT(X.OLD,Y.OLD),BALL
980  PUT(X,Y),BALL
990  IF I=82 THEN XO=X
1000  YO=Y
1010  RETURN
1020  I¥=INKEY¥
1030  IF I¥="f" OR I¥="F" THEN RR=5
1040  IF I¥="S" OR I¥="s" THEN RR=1
1050  IF I¥="R" OR I¥="r" GOTO 1270
1060  I=VAL(I¥)
1070  IF LEN(I¥)><2 THEN 1020
1080  X.OLD=X
1090  Y.OLD=Y
1100  I=ASC(RIGHT¥(I¥,1))
1110  IF I>70 AND I<74 THEN Y=Y-RR
1120  IF I>78 AND I<82 THEN Y=Y+RR
1130  IF I=71 OR I=75 OR I=79 THEN X=X-RR
1140  IF I=73 OR I=77 OR I=81 THEN X=X+RR
1150  IF X>310 THEN X=320
1160  IF X<1 THEN X=1
1170  IF Y>190 THEN Y=190
```

```
1180  IF Y<1 THEN Y=1
1190  LOCATE 1,13
1200  PRINT"                    ";
1210  LOCATE 1,13.1
1220  PRINT "半峰宽 =";
1230  PRINT USING"##.#";10 * (4-Y/35);
1240  PRINT TAB(30);"tR=";
1250  PRINT USING"##.##";X/7-5
1260  RETURN
1270  CLS
1280  COLOR 12,1
1290  PRINT TAB(2);"半峰宽(S)=";INT(100 * K1+.5)/100;"+";INT(6000 * K2+.5)/100;"tR"
1300  PRINT TAB(2);"半峰宽(k')=";INT(100 * (K1/T0/60+K2)+.5)/100;"-";INT(1000 * K2-
      .5)/1000;"k'"
1310  H8=CINT(100000! * L * K2 ^ 2/5.55)/100
1320  TO=60 * INT(T0)+100 * (T0-INT(T0))
1330  B=CINT(1000 * (1+K1/K2/T0))/1000
1340  H1=CINT(25 * H8 * (1+B) ^ 2)/100
1350  A=INT(T0/60)
1360  C=INT(T0-60 * A+.5)
1370  PRINT TAB(5);"死时间  t0=";A;"'";C;"''"
1380  PRINT TAB(5);"H1=";H1
1390  PRINT TAB(5);"H8=";H8
1400  PRINT TAB(5);"塔板高度变异系数=";B
1410  PRINT TAB(2);"H=";H8;" * (";B;"+k')/(1+k')) ^ 2"
1420  FOR I=1 TO 320 STEP 3
1430  PSET(I,199)
1440  NEXT
1450  JJ¥=INKEY¥
1460  IF JJ¥="" GOTO 1450
1470  CLS
1480  COLOR 9,8
1490  PRINT TAB(1);"编号";TAB(7);"tR";TAB(18);"k'";TAB(25);"He";TAB(31);"Hc";TAB(36);"
      偏差"
1500  FOR I=1 TO N
1510  K=60 * T(I)/TO-1
1520  H=H8 * ((B+K)/(1+K)) ^ 2
1530  H2=1000 * L/5.55 * (A(I)/T(I)) ^ 2
1540  H=CINT(100 * H)/100
1550  H2=CINT(100 * H2)/100
1560  E=CINT(100 * (H-H2))/100
1570  K=CINT(10 * K)/10
1580  A=INT(M(I))
1590  C=INT(100 * (M(I)-A)+.5)
```

```
1600 PRINT TAB(1);I;TAB(6);A;"'";C;"''";TAB(17);K;TAB(23);H2;TAB(30);H;TAB(36);E;
1610 FOR J=1 TO 320 STEP 3
1620 PSET(J,199)
1630 NEXT J
1640 JJ¥=INKEY¥
1650 IF JJ¥=" " GOTO 1640
1660 NEXT I
1670 G=CSRLIN
1680 PRINT TAB(1);I;TAB(5);
1690 INPUT M
1700 A=INT(M)
1710 C=INT(100*(M-A)+.5)
1720 T=INT(M)+(M-INT(M))/.6
1730 K=60*T/TO-1
1740 H=H8*(B+K)/(1+K))^2
1750 H=CINT(100*H)/100
1760 K=CINT(10*K)/10
1770 LOCATE G,17
1780 PRINT K;TAB(30);H
1790 I=I+1
1800 KEY ON
1810 GOTO 1670
```

【程序 12-7】 计算色谱峰的峰态偏斜度

```
10 CLS
20 KEY OFF
30 SCREEN 1,0
40 COLOR 5,7
50 LOCATE 3,5
60 PRINT"正常的色谱峰都是拖尾峰可用 Gauss";
70 PRINT"卷积模型描述.色谱峰的偏斜程度与 Gauss 卷积模型中的参数 Tuo 比 Sigma 值有关.故 Tuo/
   Sigma 定义为色谱峰的峰";
80 PRINT"态偏斜度.本程序根据后半峰宽与前半峰宽的比值计算峰态偏斜度."
90 T=2
100 DIM A(300),C(690),B1(2004),B2(2004),B3(2004),B4(2004),B6(2004)
110 FOR I=0 TO 300
120 READ C(I)
130 NEXT I
140 FOR I=310 TO 690 STEP 10
150 READ C(I)
160 NEXT I
170 FOR I=301 TO 689
180 A=10*INT(I/10)
190 C(I)=C(A)+(I-A)*(C(A+10)-C(A))/10
200 NEXT I
```

```
210 CLS
220 FOR I=2.5 TO -27.5 STEP-.1
230 M=M+1
240 N=M-1
250 B=100*(1-1/T)
260 Y=I/T+1/T/T/2
270 A(N)=EXP(Y)/T
280 IF B<0 GOTO 310
290 IF B=<690 THEN C=C(B) ELSE C=0
300 GOTO 320
310 IF -B<=690 THEN C=1-C(-B) ELSE C=1
320 A(N)=A(N)*C
330 NEXT I
340 DATA.5,.496,.492,.488,.484,.4801,.4761,.4721,.4681,.4641,.4602,.4562,.4522,.4483,
    .4443,.4404,.4364,.4325,.4286,.4247,.4207,.4168,.4129,.409,.4052,.4013,.3974,.3936,
    .3897,.3859,.3821,.3783,.3745,.3707,.3669,.3632,.3594,.3557,.352,.3483,.3446,.3409
350 DATA .3372,.3336,.33,.3264,.3228,.3192,.3156,.3121,.3085,.305,.3015,.2981,.2946,.2912,
    .2877,.2843,.281,.2776,.2743,.2709,.2676,.2643,.2611,.2578,.2546,.2514,.2483,.2451,.242,
    .2389,.2358,.2327,.2296,.2266,.2236,.2206,.2177,.2148,.2119,.209
360 DATA .2061,.2033,.2005,.1977,.1949,.1922,.1894,.1867,.1841,.1814,.1788,.1762,.1736,
    .1711,.1685,.166,.1635,.1611,.1587,.1562,.1539,.1515,.1492,.1469,.1446,.1423,.1401,
    .1379,.1357,.1335,.1314,.1292,.1271,.1251,.123,.121,.119,.117,.1151,.1131
370 DATA .1112,.1093,.1075,.1056,.1038,.102,.1003,.0985,.0968,.0951,.0934,.0918,.0901,
    .0885,.0869,.0853,.0838,.0823,.0808,.0793,.0778,.0764,.0749,.0735,.0721,.0708,.0694,
    .0681,.0668,.0655,.0643,.063,.0618,.0606,.0594,.0582,.0571,.0559,.0548,.0537
380 DATA .0526,.0516,.0505,.0495,.0485,.0475,.0465,.0455,.0446,.0436,.0427,.0418,.0409,
    .0401,.0392,.0384,.0375,.0367,.0359,.0351,.0344,.0336,.0329,.0322,.0314,.0307,.0301,
    .0294,.0287,.0281,.0274,.0268,.0262,.0256,.025,.0244,.0239,.0233,.0228,.0222
390 DATA .0217,.0212,.0207,.0202,.0197,.0192,.0188,.0183,.0179,.0174,.017,.0166,.0162,
    .0158,.0154,.015,.0146,.0143,.0139,.0136,.0132,.0129,.0125,.0122,.0119,.0116,.0113,.011,
    .0107,.0104,.0102,.0099,.00964,.00939,.00914,.00889,.00866,.00842,.0082,.00798
400 DATA .00776,.00755,.00734,.00714,.00695,.00676,.00657,.00639,.00621,.00604,.00587,
    .0057,.00554,.00539,.00523,.00508,.00494,.0048,.00466,.00453,.0044,.00427,.00415,.00402,
    .00391,.00379,.00368,.00357,.00347,.00336,.00326,.00317,.00307,.00298,.00289
410 DATA .0028,.00272,.00264,.00256,.00248,.0024,.00233,.00226,.00219,.00212,.00205,
    .00199,.00193,.00187,.00181,.00175,.00169,.00164,.00159,.00154,.00149,.00144,.00139,
    .00135
420 DATA 9.68E-4,6.87E-4,4.83E-4,3.37E-4,2.33E-4,1.59E-4,1.08E-4,7.23E-5,4.81E-5,3.17E-5,
    2.07E-5,1.33E-5,8.54E-6,5.41E-6,3.4E-6,2.11E-6,1.3E-6,7.93E-7,4.79E-7,2.87E-7,1.7E-7,
    9.96E-8,5.79E-8,3.33E-8,1.9E-8,1.07E-8,5.99E-9,3.32E-9,1.82E-9
430 DATA 9.87E-10,5.3E-10,2.82E-10,1.49E-10,7.77E-11,4.02E-11,2.06E-11,1.04E-11,5.23E-12,
    2.6E-12
440 LOCATE 8,4
450 COLOR 1,7
```

```
460  PRINT "a b";
470  FOR I=0 TO 300
480  A =199-400 * A(I) * T ^ .3
490  IF I=0 GOTO 510
500  LINE (I,B)-(I+1,A)
510  B =A
520  NEXT I
530  LINE (0,199)-(319,199)
540  A=0
550  FOR I=1 TO 100
560  IF A(I)>A THEN A =A(I)
570  NEXT I
580  LINE (0,199-200 * A * T ^ .3)-(100,199-200 * A * T ^ .3)
590  LINE (36,80)-(36,199)
600  LOCATE 1,8
610  PRINT"峰态偏斜度=-4.70+5.68 * (b/a)-.668 * (b/a)^ 2";
620  PRINT TAB(12);"请给出 a, b 值"
630  LOCATE 4,14
640  INPUT A,B
650  IF B>A THEN 690
660  LOCATE 4
670  PRINT"
680  GOTO 630
690  LOCATE 5,8
700  PRINT"峰态偏斜度=";
710  PRINT INT(100 * (-4.698952+5.684729 * B/A-.6680468 * (B/A)^ 2)+.5)/100
720  A¥=INKEY¥
730  IF A¥=""GOTO 720
740  LOCATE 3,14
750  PRINT"
760  LOCATE 4,8
770  PRINT"
780  LOCATE 5,8
790  PRINT"
800  GOTO 630
```

【程序 12-8】 计算谷点分割法及峰高定量法定量校正系数

```
10  CLS
20  SCREEN 1
30  COLOR 9,1
40  LOCATE 4,5
50  PRINT"色谱定量常采用峰高法或谷点分割的峰面";
60  PRINT"积定量法.对于不完全分离的峰,由于相互间的";
70  PRINT"影响,从而使得上述定量方法得到的数据应再";
80  PRINT"进行校正.本程序用于色谱定量校正系数的求取."
```

```
90  KEY OFF
100  FOR I=0 TO 319 STEP 3
110  PSET (I,199)
120  NEXT I
130  JJ¥=INKEY¥
140  IF JJ¥=""GOTO 130
150  CLS
160  COLOR 1,4
170  DEFINT M,N
180  DIM A(3000),C(690),B(3000)
190  FOR I=0 TO 300
200  READ C(I)
210  NEXT I
220  FOR I=310 TO 690 STEP 10
230  READ C(I)
240  NEXT I
250  FOR I=301 TO 689
260  A=10*INT(I/10)
270  C(I)=C(A)-(I-A)*(C(A+10)-C(A))/10
280  NEXT I
290  LOCATE 4,5
300  PRINT"峰态偏斜度=";
310  INPUT T
320  CLS
330  M=0
340  FOR I=5 TO -25 STEP -.01
350  M=M+1
360  N=M-1
370  B=100*(I-1/T)
380  IF B<0 THEN N1=INT(B)+1 ELSE N1=INT(B)
390  Y=-I/T+1/T/T/2
400  A(N)=EXP(Y)/T
410  IF B<0 GOTO 440
420  IF B=<689 THEN C=C(N1)+(B-N1)*(C(N1+1)-C(N1)) ELSE C=0
430  GOTO 450
440  IF -B<=689 THEN C=1-(C(-N1)+(N1-B)*(C(-N1)-C(-N1+1))) ELSE GOTO 470
450  A(N)=A(N)*C
460  NEXT I
470  A=0
480  B=A(0)
490  FOR I=1 TO 3000
500  IF A(I)<B GOTO 530 ELSE GOTO 510
510  A=I:B=A(I):A0=A(I)
520  B=A(I)
```

```
530  NEXT I
540  P=A(A)-B/2
550  FOR I=A-1 TO 0 STEP-1
560  IF ABS(A(I)-B/2)>P GOTO 590 ELSE GOTO 570
570  T1=I
580  P=ABS(A(I)-B/2)
590  NEXT I
600  P=A(A)-B/2
610  FOR I=A+1 TO 3000
620  IF ABS(A(I)-B/2)>P GOTO 650 ELSE GOTO 630
630  T2=I
640  P=ABS(A(I)-B/2)
650  NEXT I
660  LOCATE 4,5
670  COLOR 7,8
680  PRINT"峰高比=";
690  INPUT F
700  IF F<1 GOTO 740
710  J=2999
720  J1=-1
730  GOTO 760
740  J=1
750  J1=1
760  CLS
770  COLOR 12,7
780  LOCATE 4,5
790  PRINT"K1=";
800  INPUT K1
810  X=K1*(T2-T1)
820  FOR I=0 TO 3000
830  IF I-X>0 THEN C=A(I-X) ELSE C=0
840  B(I)=A(I)+C/F
850  NEXT I
860  A=0
870  P=B(0)
880  FOR I=1 TO T2
890  IF B(I)<P GOTO 920
900  A=I
910  P=B(I)
920  NEXT I
930  B=A+2
940  FOR I=A+2 TO A+X
950  IF B(I)>P GOTO 980 ELSE GOTO 960
960  P=B(I)
```

```
970  B- 1
980  NEXT I
990  IF ABS(B-A  2)<.5 OR ABS(B-A-X)<.5 THEN PRINT TAB(5):"不能分离"
1000  IF ABS(B-A-2)<.5 OR ABS(B-A-X)<.5 THEN 1220
1010  IF ABS(B-A-2)<.5 OR ABS(B-A-X)<.5 THEN BEEP
1020  IF ABS(B-A-2)<.5 OR ABS(B--A-X)<.5 THEN PRINT" "
1030  IF ABS(B-A--2)<.5 OR ABS(B-A- X)<.5 GOTO 780
1040  C1--0
1050  A2=B(3000)
1060  FOR I= 3000 TO B STEP-1
1070  IF B(I)<A2 GOTO 1090 ELSE GOTO 1080
1080  A2=B(I)
1090  NEXT I
1100  FOR I=3000 TO B+1 STEP-1
1110  C1=C1 | B(I)
1120  NEXT I
1130  BEEP
1140  C1  C1-B(B)/2
1150  K1=INT(10*K1+.5)/10
1160  K3  1-B(B)/A2
1170  K3-INT(1000*K3-.5)/1000
1180  IF K3=0 THEN PRINT TAB(5);"不能分离";IF K3=0 THEN 1220;BEEP;GOTO 780
1190  C= 1+1/F-C1/100
1200  PRINT TAB(5);"K3  ";K3
1210  PRINT"面积法前峰校正系数=";INT(100/C+.5)/100,"面积法后峰校正系数 =";INT(10000/C1/F
      +.5)/100,"峰高法前峰校正系数  ";INT(1000*A0/B(A)+.5)/1000,"峰高法后峰校正;INT(1000
      *A0/A2/F+.5)/1000
1220  FOR I=0 TO 319 STEP 3
1230  PSET(I,199)
1240  NEXT I
1250  JJ¥=INKEY¥
1260  IF JJ¥  ""GOTO 1220
1270  CLS
1280  GOTO 780
1290  DATA .5,.496,.492,.488,.484,.4801,.4761,.4721,.4681,.4641,.4602,.4562,.4522,.4483,.
      4443,.4404,.4364,.4325,.4286,.4247,.4207,.4168,.4129,.409,.4052,.4013,.3974,.3936,.
      3897,.3859,.3821,.3783,.3745,.3707,.3669,.3632,.3594,.3557,.352,.3483,.3446,.3409
1300  DATA .3372,.3336,.33,.3264,.3228,.3192,.3156,.3121,.3085,.305,.3015,.2981,.2946,.
      2912,.2877,.2843,.281,.2776,.2743,.2709,.2676,.2643,.2611,.2578,.2546,.2514,.2483,.
      2451,.242,.2389,.2358,.2327,.2296,.2266,.2236,.2206,.2177,.2148,.2199,.209
1310  DATA .2061,2033,.2005,.1977,.1949,.1922,.1894,.1867,.1841,.1814,.1788,.1762,.1736,.
      1711,.1685,.166,.1635,.1611,.1587,.1562,.1539,.1515,.1492,.1469,.1446,.1423,.1401,.
      1379,.1357,.1335,.1314,.1292,.1271,.1251,.123,.121,.119,.117,.1151,.1131
1320  DATA .1112,.1093,.1075,.1056,.1038,.102,.1003,.0985,.0968,.0951,.0934,.0918,.0901,.
```

```
0885,.0869,.0853,.0838,.0823,.0808,.0793,.0778,.0764,.0749,.0735,.0721,.0708,.0694,.
0681,.0668,.0655,.0643,.063,.0618,.0605,.0594,.0582,.0571,.0559,.0548,.0537
1330 DATA .0526,.0516,.0505,.0495,.0485,.0475,.0465,.0455,.0446,.0436,.0427,.0418,.0409,.
0401,.0392,.0384,.0375,.0367,.0359,.0351,.0341,.0336,.0329,.0322,.0314,.0307,.0301,.
0294,.0287,.0281,.0274,.0268,.0262,.0256,.025,.0244,.0239,.0233,.0228,.0222
1340 DATA .0217,.0212,.0207,.0202,.0197,.0192,.0188,.0183,.0179,.0174,.017,.0166,.0162,.
0158,.0154,.015,.0146,.0143,.0139,.0136,.0132,.0129,.0125,.0122,.0119,.0116,.0113,.
011,.0107,.0104,.0102,.0099,.00964,.00939,.00914
1350 DATA .00889,.00866,.00842,.0082,.00798
1360 DATA .00776,.00755,.00734,.00714,.00695,.00676,.00657,.00639,.00621,.00604,.00587,.
0057,.00554,.00539,.00523,.00508,.00494,.0048,.00466,.00453,.0044,.00427,.00415,.
00402,.00391,.00379,.00368,.00357,.00347,.00336,.00326,.00317,.00307,.00298,.00289
1370 DATA .0028,.00272,.00264,.00256,.00248,.0024,.00233,.00226,.00219,.00212,.00205,.
00199,.00193,.00187,.00181,.00175,.00169,.00164,.00159,.00154,.00149,.00144,.00139,.
00135
1380 DATA 9.68E-4,6.87E-4,4.83E-4,3.37E-4,2.33E-4,1.59E-4,1.08E-4,7.23E-5,4.81E-5,3.17E-5,
2.07E-5,1.33E-5,8.54E-6,5.41E-6,3.4E-6,2.11E-6,1.3E-6,7.93E-7,4.79E-7,2.87E-7,1.7E-7,
9.96E-8,5.79E-8,3.33E-8,1.9E-8,1.07E-8,5.99E-9,3.32E-9,1.82E-9
1390 DATA 9.87E-10,5.3E-10,2.82E-10,1.49E-10,7.77E-11,4.02E-11,2.06E-11,1.04E-11,5.23E-12,
2.6E-12
```

【程序 12-9】 K_1 和 K_3 换算程序

```
10 SCREEN 1,0
20 COLOR 12,0
30 KEY OFF
40 CLS
50 LOCATE 4,5
60 PRINT"色谱峰的分离程度可用总分离效能指标";
70 PRINT"K1 或峰高分离度 K3 表示,本程序用于 K1 和 K3 的相互换算."
80 FOR I=0 TO 319 STEP 3
90 PSET (I,199)
100 NEXT
110 JJ¥=INKEY¥
120 IF JJ¥=""GOTO 110
130 CLS
140 COLOR 6,7
150 DEFINT M,N
160 DIM A(3000),C(690),B(3000),D(3000)
170 LOCATE 4,5
180 PRINT"您需要如何换算 (请回答 1 或 2)"
190 PRINT TAB(8);"1. 从 K1 到 K3"
200 PRINT TAB(8);"2. 从 K3 到 K1"
210 PRINT TAB(12);
220 INPUT S
230 IF S=1 OR S=2 GOTO 240 ELSE GOTO 180
```

```
210  FOR I= 0 TO 300
250  READ C(I)
260  NEXT I
270  FOR I= 310 TO 690 STEP 10
280  READ C(I)
290  NEXT I
300  FOR I=301 TO 689
310  A=10*INT(I/10)
320  C(I)=C(A)+(I-A)*(C(A+10)-C(A))/10
330  NEXT I
340  CLS
350  LOCATE 4,9
360  COLOR 5,7
370  PRINT"峰态偏斜度 :";
380  INPUT T
390  M=0
400  FOR I=5 TO -25 STEP -.01
410  M=M+1
420  N=M-1
430  B=100*(I+1/T)
440  IF B<0 THEN N1=INT(B)+1 ELSE N1=INT(B)
450  Y=I/T+1/T/T/2
460  A(N)=EXP(Y)/T
470  IF B<0 GOTO 500
480  IF B=<689 THEN C=C(N1)+(B-N1)*(C(N1+1)-C(N1))ELSE C=0
490  GOTO 510
500  IF -B<=689 THEN C=1-(C(-N1)+(N1-B)*(C(-N1)-C(-N1+1))) ELSE GOTO 530
510  A(N)=A(N)*C
520  NEXT I
530  A=0
540  B=A(0)
550  FOR I=1 TO 3000
560  IF A(I)<B GOTO 590 ELSE GOTO 570
570  A=I:B=A(I):A0=A(I)
580  B=A(I)
590  NEXT I
600  P=A(A)-B/2
610  FOR I= A-1 TO 0 STEP-1
620  IF ABS(A(I)-B/2)>P GOTO 650 ELSE GOTO 630
630  T1=I
640  P=ABS(A(I)-B/2)
650  NEXT I
660  P=A(A)-B/2
670  FOR I=A+1 TO 3000
```

```
680  IF ABS(A(I)-B/2)>P GOTO 710 ELSE GOTO 690
690  T2=I
700  P=ABS(A(I)-B/2)
710  NEXT I
720  COLOR 4,7
730  CLS
740  LOCATE 4,11
750  PRINT"峰高比=";
760  INPUT F
770  IF S=2 GOTO 1280
780  COLOR 9,0
790  LOCATE 6
800  PRINT TAB(9);"请给我 K1 的值"
810  LOCATE 7
820  PRINT TAB(12);"K1=";
830  INPUT K1
840  X=K1*(T2-T1)
850  GOSUB 1870
860  GOSUB 1910
870  A=0
880  P=B(0)
890  FOR I=1 TO T2
900  IF B(I)<P GOTO 930
910  A=I
920  P=B(I)
930  NEXT I
940  B=A+2
950  FOR I=A+2 TO A+X
960  IF B(I)>P GOTO 990 ELSE GOTO 970
970  P=B(I)
980  B=I
990  NEXT I
1000  IF ABS(B-A-2)<.5 OR ABS(B-A-X)<.5 THEN PRINT,"不能分离"
1010  IF ABS(B-A-2)<.5 OR ABS(B-A-X)<.5 GOTO 1130
1020  A2=B(3000)
1030  FOR I=3000 TO B STEP -1
1040  IF B(I)<A2 GOTO 1060 ELSE GOTO 1050
1050  A2=B(I)
1060  NEXT I
1070  BEEP
1080  K3=1-B(B)/A2
1090  K3=INT(1000*K3+.5)/1000
1100  IF K3=0 THEN PRINT,"不能分离"
1110  IF K3=0 GOTO 1130
```

```
1120 PRINT TAB(12);"K3=";K3
1130 FOR I=0 TO 319 STEP 3
1140 PSET(I,199)
1150 NEXT
1160 JJ¥=INKEY¥
1170 IF JJ¥=" "GOTO 1160 ELSE 730
1180 DATA .5,.496,.492,.488,.484,.4801,.4761,.4721,.4681,.4641,.4602,.4562,.4522,.4483,.
     4443,.4404,.4364,.4325,.4286,.4247,.4207,.4168,.4129,.409,.4052,.4013,.3974,.3936,.
     3897,.3859,.3821,.3783,.3745,.3707,.3669,.3632,.3594,.3557,.352,.3483,.3446,.3409
1190 DATA .3372,.3336,.33,.3264,.3228,.3192,.3156,.3121,.3085,.305,.3015,.2981,.2946,.
     2912,.2877,.2843,.281,.2776,.2743,.2709,.2676,.2643,.2611,.2578,.2546,.2514,.2483,.
     2451,.242,.2389,.2358,.2327,.2296,.2266,.2236,.2206,.2177,.2148,.2119,.209
1200 DATA .2061,.2033,.2005,.1977,.1949,.1922,.1894,.1867,.1841,.1814,.1788,.1762,.1736,.
     1711,.1685,.166,.1635,.1611,.1587,.1562,.1539,.1515,.1492,.1469,.1446,.1423,.1401,.
     1379,.1357,.1335,.1314,.1292,.1271,.1251,.123,.121,.119,.117,.1151,.1131
1210 DATA .1112,.1093,.1075,.1056,.1038,.102,.1003,.0985,.0968,.0951,.0934,.0918,.0901,.
     0885,.0869,.0853,.0838,.0823,.0808,.0793,.0778,.0764,.0749,.0735,.0721,.0708,.0694,.
     0681,.0668,.0655,.0643,.063,.0618,.0606,.0594,.0582,.0571,.0559,.0548,.0537
1220 DATA .0526,.0516,.0505,.0495,.0485,.0475,.0465,.0455,.0446,.0436,.0427,.0418,.0409,.
     0401,.0392,.0384,.0375,.0367,.0359,.0351,.0344,.0336,.0329,.0322,.0314,.0307,.0301,.
     0294,.0287,.0281,.0274,.0268,.0262,.0256,.025,.0244,.0239,.0233,.0228,.0222
1230 DATA .0217,.0212,.0207,.0202,.0197,.0192,.0188,.0183,.0179,.0174,.017,.0166,.0162,.
     0158,.0154,.015,.0146,.0143,.0139,.0136,.0132,.0129,.0125,.0122,.0119,.0116,.0113,.
     011,.0107,.0104,.0102,.0099,.00964,.00939,.00914,.00889,.00866,.00842,.0082,.00798
1240 DATA .00776,.00755,.00734,.00714,.00695,.00676,.00657,.00639,.00621,.00604,.00587,.
     0057,.00554,.00539,.00523,.00508,.00494,.0048,.00466,.00453,.0044,.00427,.00415,.
     00402,.00391,.00379,.00368,.00357,.00347,.00336,.00326,.00317,.00307,.00298,.00289
1250 DATA .0028,.00272,.00264,.00256,.00248,.0024,.00233,.00226,.00219,.00212,.00205,.
     00199,.00193,.00187,.00181,.00175,.00169,.00164,.00159,.00154,.00149,.00144,.00139,.
     00135
1260 DATA 9.68E-4,6.87E-4,4.83E-4,3.37E-4,2.33E-4,1.59E-4,1.08E-4,7.23E-5,4.81E-5,3.17E-5,
     2.07E-5,1.33E-5,8.54E-6,5.41E-6,3.4E-6,2.11E-6,1.3E-6,7.93E-7,4.79E-7,2.87E-7,1.7E-7,
     9.96E-8,5.79E-8,3.33E-8,1.9E8,1.07E-8,5.99E-9,3.32E-9,1.82E-9
1270 DATA 9.87E-10,5.3E-10,2.82E-10,1.49E-10,7.77E-11,4.02E-11,2.06E-11,1.04E-11,5.23E-12,
     2.6E-12
1280 LOCATE 6,9
1290 PRINT"请给我 K3 的值"
1300 PRINT TAB(11);"K3=";
1310 INPUT K3
1320 IF K3<=0 OR K3>.1 GOTO 1330 ELSE 1370
1330 LOCATE 6,9
1340 PRINT"              "
1350 PRINT TAB(11);"            "
1360 GOTO 1280
```

```
1370  GOSUB 1870
1380  D0=0
1390  D1=5
1400  D2=10
1410  FOR J=1 TO 10
1420  X=D1*(T2-T1)
1430  GOSUB 1910
1440  P=B(A)
1450  A2=A
1460  FOR I=A+1 TO A-X
1470  IF P<B(I) GOTO 1510
1480  A2=I
1490  P=B(I)
1500  IF A2=A+X GOTO 1730
1510  NEXT I
1520  T3=A2
1530  FOR I=T3 TO 3000
1540  IF P>B(I) GOTO 1570
1550  A2=I
1560  P=B(I)
1570  NEXT I
1580  T4=A2
1590  P=B(T1)
1600  A2=T1
1610  FOR I=T1 TO T2
1620  IF P>B(I) GOTO 1650
1630  A2=I
1640  P=B(I)
1650  NEXT I
1660  T5=A2
1670  IF B(T5)>B(T4) GOTO 1700
1680  K4=1-B(T3)/B(T5)
1690  GOTO 1710
1700  K4=1-B(T3)/B(T4)
1710  IF K4>K3 GOTO 1760
1720  IF K4=K3 GOTO 1800
1730  D0=D1
1740  D1=(D1+D2)/2
1750  GOTO 1780
1760  D2=D1
1770  D1=(D0+D1)/2
1780  NEXT J
1790  BEEP
1800  PRINT TAB(11);"K1=";INT(100*D1+.5)/100
```

```
1810 FOR I=0 TO 319 STEP 3
1820 PSET (I,199)
1830 NEXT
1840 JJ¥=INKEYY
1850 IF JJ¥ · "" GOTO 1840
1860 GOTO 720
1870 FOR I=0 TO 3000
1880 D(I)=A(I)/F
1890 NEXT I
1900 RETURN
1910 FOR I=0 TO 3000
1920 IF I<X THEN B(I) · A(I) ELSE B(I)=A(I)+D(I-X)
1930 NEXT I
1940 RETURN
```

【程序 12-10】 色谱流出曲线拟合程序

```
10 SCREEN 1,0
20 COLOR 1,7
30 KEY OFF
40 CLEAR
50 CLS
60 LOCATE 3,5
70 PRINT TAB(5);"本程序用于演示气相色谱及液相色谱在不";
80 PRINT"同条件下的谱图."
90 FOR I=1 TO 3500
100 NEXT I
110 CLS
120 PRINT TAB(5);"色谱图的图形与组分的性质有关,也与柱";
130 PRINT"子的动力学性能有关.组分的性质主要是反映";
140 PRINT"在保留值与柱温(GC)或流动相组成(LC";
150 PRINT")的关系.柱子的动力学性能主要是反映在色";
160 PRINT"谱峰半峰宽随保留值变化的关系及峰态偏斜度";
170 PRINT"的规律,为了预测不同条件下的谱图,您必需要";
180 PRINT"知道保留值方程 lnk=a+b/T(GC)";
190 PRINT "或 lnk=a+b lnCB+cCB(LC)的系数.";
200 FOR I=0 TO 319 STEP 3
210 PSET (I,199)
220 NEXT I
230 JJ¥=INKEY¥
240 IF JJ¥="" GOTO 230
250 CLS
260 PRINT TAB(5);"在动力学方面,您应当知道半峰宽方程:"
270 PRINT TAB(10);"半峰宽 =a+bk"
280 PRINT"的系数及峰态偏斜度."
290 PRINT TAB(5);"因此,在进行下一步操作之前,应当运用前";
```

```
300  PRINT"面介绍的程序计算出相应参数".
310  FOR I=0 TO 319 STEP 3
320  PSET (I,199)
330  NEXT I
340  JJ¥=INKEY¥
350  IF JJ¥-"" GOTO 340
360  CLS
370  LOCATE 3,6
380  PRINT "系统是GC还是LC";
390  INPUT AA¥
400  IF AA¥="gc" THEN AA¥="GC"
410  IF AA¥="lc" THEN AA¥="LC"
420  IF AA¥="LC" OR AA¥="GC" GOTO 450 ELSE GOTO 390
430  LOCATE 7,15
440  PRINT"              "
450  CLS
460  LOCATE 10,15
470  DIM A¥(20,100),A(150),C(690),B(100),D(100),E(100),K(100),P(10000),F(100),K3(99)
480  CLS
490  COLOR 4,7
500  LOCATE 3,4
510  PRINT"请输入半峰宽方程"
520  LOCATE 5,10
530  PRINT"半峰宽=a+b*k"
540  LOCATE 7
550  PRINT"的系数a与b";
560  INPUT 01,02
570  CLS
580  COLOR 1,8
590  PRINT TAB(4);"请输入化合物名称,含量以及方程"
600  PRINT TAB(6);"lnk=a+b";
610  IF AA¥="LC" GOTO 650
620  PRINT "/T"
630  PRINT"之系数";
640  GOTO 670
650  PRINT"lnCB+cCB"
660  PRINT"之系数"
670  N1=0
680  IF AA¥="LC" GOTO 770
690  PRINT TAB(4);"(数据结束请键入O,O,O,O,)"
700  FOR I=1 TO 21
710  PRINT I;
720  INPUT A¥(20,I),E(I),B(I),D(I)
730  IF E(I)=0 GOTO 840
```

```
740  N1=N1+1
750  NEXT I
760  GOTO 840
770  PRINT TAB(4);"(数据结束请键入O,O,O,O,O)"
780  FOR I=1 TO 100
790  PRINT I;
800  INPUT A¥(20,I),E(I),B(I),D(I),F(I)
810  IF E(I)=0 GOTO 840
820  N1=N1+1
830  NEXT I
840  CLS
850  SCREEN 2
860  PRINT TAB(20);"请复核数据"
870  PRINT TAB(10);"如果发现错误数据,请先按一下E键,再输入错误数据的编号."
880  PRINT"编号";TAB(10);"名 称";TAB(32);"含量";TAB(40);"a";TAB(50);"b";TAB(60);
890  IF AA¥  "LC" THEN PRINT"c" ELSE PRINT" "
900  FOR I= 1 TO N1
910  PRINT I;TAB(10);A¥(20,I);
920  PRINT TAB(32);E(I);TAB(39);B(I);TAB(49);D(I);TAB(59);
930  IF AA¥  "LC"THEN PRINT F(I) ELSE PRINT" "
940  JJ¥=INKEY¥
950  IF JJ¥="E" OR JJ¥="c" THEN GOSUB 3010
960  IF JJ¥  " "GOTO 940
970  NEXT I
980  SCREEN 1
990  COLOR 5,7
1000  FOR I=0 TO 300
1010  READ C(I)
1020  NEXT I
1030  FOR I=310 TO 690 STEP 10
1040  READ C(I)
1050  NEXT I
1060  FOR I=301 TO 689
1070  A=10*INT(I/10)
1080  C(I)=C(A)-(I-A)*(C(A+10)-C(A))/10
1090  NEXT I
1100  COLOR 8,7
1110  LOCATE 4,12
1120  PRINT"峰态偏斜度";
1130  INPUT T
1140  M=0
1150  N=0
1160  FOR I=2.5 TO -12.5 STEP -.1
1170  M=M-1
```

```
1180  N=M-1
1190  B=100 * (I+1/T)
1200  Y - I/T+1/T/T/2
1210  A(N)=EXP(Y)/T
1220  IF B<0 GOTO 1250
1230  IF B=<690 THEN C =C(B) ELSE C=0
1240  GOTO 1260
1250  IF -B<=690 THEN C=1-C(-B) ELSE C=1
1260  A(N)=A(N) * C
1270  NEXT I
1280  CLS
1290  LOCATE 4,12
1300  IF AA¥="GC" THEN PRINT"柱温";ELSE PRINT"强溶剂浓度";
1310  INPUT TT
1320  FOR I=1 TO N1
1330   IF AA¥ ="GC" THEN A=B(I)+D(I)/(TT+273.16) ELSE A=B(I)+D(I) * LOG(TT)+
       F(I) * TT
1340  K(I)=EXP(A)
1350  NEXT I
1360  FOR I=1 TO N1-1
1370  FOR J=I+1 TO N1
1380  IF K(I)<K(J) THEN 1450
1390  SWAP A¥(20,I),A¥(20,J)
1400  SWAP K(I),K(J)
1410  SWAP B(I),B(J)
1420  SWAP D(I),D(J)
1430  SWAP E(I),E(J)
1440  SWAP F(I),F(J)
1450  NEXT J,I
1460  FOR I=0 TO 10000
1470  P(I)= 0
1480  NEXT I
1490  X=2.24-.64 * T
1500  FOR I=1 TO N1
1510  GOSUB 2690
1520  NEXT I
1530  A=P(1)
1540  FOR I=2 TO 10000
1550  IF A<P(I) THEN A=P(I)
1560  NEXT I
1570  SCREEN 2
1580  FOR I=1 TO 10000
1590  P(I)=90 * P(I)/A
1600  NEXT I
```

```
1610  CLS
1620  LOCATE 6,9
1630  PRINT"0";TAB(75);
1640  IF K(N1)>=1 THEN PRINT" K";
1650  IF K(N1)<1 AND K(N1)>=.1 THEN PRINT".1*K";
1660  LOCATE 7,1
1670  IF AA¥="GC" THEN PRINT"柱温:";TT;"c";ELSE PRINT"强溶剂浓度:"INT(100 * TT+.
      5);"%";
1680  LINE(0,91)-(639,91)
1690  IF K(N1)>.9 THEN GOSUB 2790 ELSE GOSUB 2870
1700  IF K(N1)=>10 THEN GOSUB 2940
1710  FOR I=1 TO N1-1
1720  A=P(1000+8000*K(I)/K(N1))
1730  YY=1000+8000*K(I)/K(N1)
1740  FOR J=1000+8000*K(I)/K(N1) TO 1000+8000*K(I+1)/K(N1)
1750  IF P(J)=0 GOTO 1790
1760  IF A<P(J) THEN 1790
1770  YY=J
1780  A=P(J)
1790  NEXT J
1800  A2=P(1000+8000*K(I)/K(N1))
1810  FOR J=1000+8000*K(I)/K(N1) TO YY
1820  IF P(J)>A2 THEN A2=P(J)
1830  NEXT J
1840  A1=P(1000+8000*K(I+1)/K(N1))
1850  FOR J=1000+8000*K(I+1)/K(N1) TO YY STEP-1
1860  IF P(J)>A1 THEN A1=P(J)
1870  NEXT J
1880  IF A2<A1 THEN K3(I)=1-A/A2 ELSE K3(I)=1-A/A1
1890  NEXT I
1900  K3=1
1910  FOR I=1 TO N1-1
1920  IF K3>K3(I) THEN K3=K3(I)
1930  NEXT I
1940  IF K3<0 THEN K3=0
1950  M1=1
1960  A=.0639
1970  PRINT "K3 min=";INT(100*K3+.5)/100
1980  FOR I=1 TO 9984 STEP 15.65
1990  LINE(A*(I-1),90-P(I-1))-(A*I,90-P(I+15.65))
2000  NEXT I
2010  BEEP
2020  LOCATE 8,30
2030  PRINT"键 功 能"
```

```
2040  PRINT"R:改变条件再算  K:显示各组分的容量因子  M:放大  D:展宽  S:停止"
2050  LOCATE 10
2060  JJ¥  INKEY¥
2070  IF JJ¥  "m" OR JJ¥="M" THEN 2170
2080  IF JJ¥="R" OR JJ¥="r" GOTO 2140
2090  IF JJ¥="P" OR JJ¥="p" THEN GOSUB 3160
2100  IF JJ¥  "d" OR JJ¥="D" GOTO 2380
2110  IF JJ¥="s" OR JJ¥="S" THEN STOP
2120  IF JJ¥  "k" OR JJ¥="K" THEN 3360
2130  GOTO 2060
2140  CLS
2150  LOCATE 5,20
2160  GOTO 1300
2170  CLS
2180  LOCATE 5,20
2190  INPUT "放大倍数";M
2200  M1=M1*M
2210  FOR I=1 TO 10000
2220  P(I)  M*P(I)
2230  NEXT I
2240  CLS
2250  LOCATE 6,9
2260  PRINT"0";TAB(74);
2270  IF K(N1)>.9 THEN GOSUB 2790 ELSE GOSUB 2870
2280  IF K(N1)>=10 THEN GOSUB 2940
2290  IF K(N1)>.9 THEN PRINT"k" ELSE PRINT".1*k";
2300  LOCATE 7
2310  IF AA¥ "LC"GOTO 2350
2320  PRINT"柱温:";TT;"c";TAB(20);"放大倍数:";M1;
2330  LINE(0,91)-(639,91)
2340  GOTO 1970
2350  PRINT"强溶剂浓度:";INT(100*TT+.5);"%";TAB(20);"放大倍数:";M1;
2360  LINE(0,91)-(639,91)
2370  GOTO 1970
2380  CLS
2390  LOCATE 5,20
2400  INPUT "展宽范围(k ):";D1,D2
2410  CLS
2420  LOCATE 6
2430  PRINT"k=";D1;TAB(70);"k=";D2
2440  LINE(0,91)-(639,91)
2450  I1=1000+8000*D1/K(N1)
2460  I2  1000+8000*D2/K(N1)
2470  FOR I=I1 TO I2
```

```
2480  IF I>9998 GOTO 2520
2490  LINE (639 * (I-I1)/I2-I1),90-P(I))-(639 * (I+1-I1)(I2-I1),90-P(I+1))
2500  NEXT I
2510  BEEP
2520  LOCATE 7
2530  IF AA¥="LC"GOTO 2560
2540  PRINT "柱温:";TT;"c";TAB(20);"显示范围 k 从";D1;"到";D2;
2550  GOTO 2060
2560  PRINT"强溶剂浓度:";INT(100 * TT+.5)"%";TAB(20);"显示范围 k 从";D1;"到";D2;
2570  GOTO 2060
2580  DATA .5,.496,.492,.488,.484,.4801,.4761,.4721,.4681,.4641,.4602,.4562,.4522,.4483,.
      4443,.4404,.4364,.4325,.4286,.4247,.4207,.4168,.4129,.409,.4052,.4013,.3974,.3936,.
      3897,.3859,.3821,.3783,.3745,.3707,.3669,.3632,.3594,.3557,.352,.3483,.3446,.3409
2590  DATA .3372,.3336,.33,.3264,.3228,.3192,.3156,.3121,.3085,.305,.3015,.2981,.2946,.
      2912,.2877,.2843,.281,.2776,.2743,.2709,.2676,.2643,.2611,.2578,.2546,.2514,.2483,.
      2451,.242,.2389,.2358,.2327,.2296,.2266,.2236,.2206,.2177,.2148,.2119,.209
2600  DATA .2061,.2033,.2005,.1977,.1949,.1922,.1894,.1867,.1841,.1814,.1788,.1762,.1736,.
      1711,.1685,.166,.1635,.1611,.1587,.1562,.1539,.1515,.1492,.1469,.1446,.1423,.1401,.
      1379,.1357,.1335,.1314,.1292,.1271,.1251,.123,.121,.119,.117,.1151,.1131
2610  DATA .1112,.1093,.1075,.1056,.1038,.102,.1003,.0985,.0968,.0951,.0934,.0918,.0901,.
      0885,.0869,.0853,.0838,.0823,.0808,.0793,.0778,.0764,.0749,.0735,.0721,.0708,.0694,.
      0681,.0668,.0655,.0643,.063,.0618,.0606,.0594,.0582,.0571,.0559,.0548,.0537
2620  DATA .0526,.0516,.0505,.0495,.0485,.0475,.0465,.0455,.0446,.0436,.0427,.0418,.0409,.
      0401,.0392,.0384,.0375,.0367,.0359,.0351,.0344,.0336,.0329,.0322,.0314,.0307,.0301,.
      0294,.0287,.0281,.0274,.0268,.0262,.0256,.025,.0244,.0239,.0233,.0228,.0222
2630  DATA .0217,.0212,.0207,.0202,.0197,.0192,.0188,.0183,.0179,.0174,.017,.0166,.0162,.
      0158,.0154,.015,.0146,.0143,.0139,.0136,.0132,.0129,.0125,.0122,.0119,.0116,.0113,.
      011,.0107,.0104,.0102,.0099,.00964,.00939,.00914,.00889,.00866,.00842
2640  DATA .0082,.00798
2650  DATA .00776,.00755,.00734,.00714,.00695,.00676,.00657,.00639,.00621,.00604,.00587,.
      0057,.00554,.00539,.00523,.00508,.00494,.0048,.00466,.00453,.0044,.00427,.00415,.
      00402,.00391,.00379,.00368,.00357,.00347,.00336,.00326,.00317,.00298,.00289
2660  DATA .0028,.00272,.00264,.00256,.00248,.0024,.00233,.00226,.00219,.00212,.00205,.
      00199,.00193,.00187,.00181,.00175,.00169,.00164,.00159,.00154,.00149,.00144,.00139,.
      00135
2670  DATA 9.68E-4,6.87E-4,4.83E-4,3.37E-4,2.33E-4,1.59E-4,1.08E-4,7.23E-5,4.81E-5,3.17E-5,
      2.07E-5,1.33E-5,8.54E-6,5.41E-6,3.4E-6,2.11E-6,1.3E-6,7.93E-7,4.79E-7,2.87E-7,1.7E-7,
      9.96E-8,5.79E-8,3.33E-8,1.9E-8,1.07E-8,5.99E-9,3.32E-9,1.82E-9
2680  DATA 9.87E-10,5.3E-10,2.82E-10,1.49E-10,7.77E-11,4.02E-11,2.06E-11,1.04E-11,5.23E-12,
      2.6E-12
2690  C=.01+.02 * K(I)
2700  S=8000 * K(I)/K(N1)+1000-5000 * T * C/K(N1)/X
2710  N=-1
2720  M  K(N1) * X/C/800
```

```
2730  FOR J=S-20000! *C/X/K(N1) TO S+100000! *C/X/K(N1)
2740  IF J>10000 GOTO 2780
2750  N=N+1
2760  P(J)=P(J)+A(N*M)/X/C*E(I)
2770  NEXT J
2780  RETURN
2790  X=8000/K(N1)
2800  N=-1
2810  FOR I=1000 TO 10000 STEP X
2820  N=N+1
2830  PSET ((1000+N*X)*.0639,92)
2840  PSET ((1000+N*X)*.0639,93)
2850  NEXT I
2860  RETURN
2870  X=8000/K(N1)
2880  N=-1
2890  FOR I=1000 TO 10000 STEP .1*X
2900  N=N+1
2910  PSET ((1000+N*.1*X)*.0639,92)
2920  NEXT I
2930  RETURN
2940  X=8000/K(N1)
2950  N=-1
2960  FOR I=1000 TO 10000 STEP 10*X
2970  N=N+1
2980  PSET ((1000+N*10*X)*.0639,94)
2990  NEXT I
3000  RETURN
3010  PRINT TAB(4);"组分编号";
3020  INPUT A
3030  PRINT TAB(4);"请输入化合物名称,含量以及方程"
3040  PRINT TAB(6);"ln k=a+b";
3050  IF AA¥="LC" GOTO 3110
3060  PRINT"/T"
3070  PRINT"之系数";
3080  PRINT TAB(10);
3090  INPUT A¥(20,A),E(A),B(A),D(A)
3100  RETURN
3110  PRINT"ln CB+cCB"
3120  PRINT"之系数"
3130  PRINT TAB(10);
3140  INPUT A¥(20,A),E(A),B(A),D(A),F(A)
3150  RETURN
3160  CLS
```

```
3170  SCREEN 1
3180  COLOR 1,7
3190  LOCATE 3,6
3200  PRINT"文件名":
3210  INPUT A¥
3220  A(0)  TT
3230  OPEN "a¥" FOR OUTPUT AS #1
3240  FOR I=0 TO 10000
3250  WRITE #1,A(I)
3260  NEXT I
3270  CLOSE #1
3280  LOCATE 5,6
3290  PRINT"文件已存入磁盘"
3300  A(0)  0
3310  FOR I=1 TO 10000
3320  NEXT I
3330  BEEP
3340  SCREEN 2
3350  RETURN
3360  CLS
3370  FOR X  1 TO N1
3380  V  CSRLIN
3390  IF V-10 GOTO 3420
3400  PRINT A¥(20,X);":";K(X)
3410  GOTO 3480
3420  FOR Y=0 TO 639 STEP 3
3430  PSET(Y,199)
3440  NEXT
3450  JJ¥  INKEY¥
3460  IF JJ¥=" "GOTO 3450
3470  CLS
3480  NEXT
3490  FOR Y=0 TO 639 STEP 3
3500  PSET(Y,199)
3510  NEXT Y
3520  JJ¥=INKEY¥
3530  IF JJ¥=" "GOTO 3520
3540  CLS
3550  GOTO 2060
```

【程序 12-11】 色谱最佳分离条件选择

```
10  SCREEN 1,0
20  COLOR 1,7
30  KEY OFF
40  CLEAR
```

```
50  CLS
60  LOCATE 3,5
70  PRINT TAB(5);"色谱分离条件的选择是色谱理论的三大问";
80  PRINT"题之一,本程序用于选择色谱分离条件."
90  PRINT TAB(5);"根据色谱热力学理论与色谱动力学理论可";
100  PRINT"以推测出各种条件下的谱图,在此拟合谱图的";
110  PRINT"基础上,便可将最佳色谱条件选出."
120  FOR I  0 TO 319 STEP 3
130  PSET(I,199)
140  NEXT I
150  JJ¥=INKEY¥
160  IF JJ¥  ""GOTO 150
170  CLS
180  PRINT TAB(5);"在选择最佳色谱操作条件之前,需采用前"
190  PRINT"面介绍的程序计算出保留值方程:"
200  PRINT TAB(5);"l n k=a+b/T (GC)"
210  PRINT TAB(5);"l n k=a+b l n C B+c C B (LC)"
220  PRINT"的系数,以及半峰宽方程:"
230  PRINT TAB(5);"半峰宽-a-bk"
240  PRINT"的系数和峰态偏斜度."
250  FOR I=0 TO 319 STEP 3
260  PSET(I,199)
270  NEXT I
280  JJ¥  INKEY¥
290  IF JJ¥  ""GOTO 280
300  CLS
310  LOCATE 3
320  PRINT TAB(5);"本程序可用于GC及LC请问您欲选择气":
330  PRINT"相色谱还是液相色谱的最佳条件"
340  PRINT TAB(10);"(回答GC或LC)"
350  PRINT TAB(18);
360  INPUT AA¥
370  IF AA¥  "gc" THEN AA¥="GC"
380  IF AA¥  "lc" THEN AA¥="LC"
390  IF AA¥="LC" OR AA¥="GC" GOTO 430
400  LOCATE 7,15
410  PRINT"                  "
420  GOTO 180
430  CLS
440  LOCATE 10,15
450  DIM A¥(20,100),A(250),C(690),B(100),B(100),E(100),K(100),P(10000),F(100),K3(99),
     K4(100)
460  CLS
470  COLOR 4,7
```

```
480 LOCATE 3,4
490 PRINT"请输入半峰宽方程"
500 LOCATE 5
510 PRINT TAB(5);"半峰宽=a+b*k"
520 LOCATE 7
530 PRINT"的系数 a 与 b";
540 INPUT 01,02
550 CLS
560 COLOR 1,8
570 PRINT TAB(4);"请输入化合物名称,含量以及方程"
580 PRINT TAB(6);"lnk= a+b";
590 IF AA¥ ="LC" GOTO 630
600 PRINT"/T"
610 PRINT"之系数";
620 GOTO 650
630 PRINT"lnCB-cCB"
640 PRINT"之系数"
650 N1=0
660 IF AA¥ ="LC"GOTO 750
670 PRINT TAB(4);"(数据结束请键入 O,O,O,O)"
680 FOR I=1 TO 100
690 PRINT I;
700 INPUT A¥(20,I),E(I),B(I),D(I)
710 IF E(I)=0 GOTO 820
720 N1=N1+1
730 NEXT I
740 GOTO 820
750 PRINT TAB(4);"(数据结束请键入 O,O,O,O,O)"
760 FOR I=1 TO 100
770 PRINT I;
780 INPUT A¥(20,I),E(I),B(I),D(I),F(I)
790 IF E(I)=0 GOTO 820
800 N1=N1+1
810 NEXT I
820 CLS
830 SCREEN 2
840 PRINT TAB(20);"请 复 核 数 据"
850 PRINT"编号";TAB(10);"名 称";TAB(32);"含量";TAB(40);"a";TAB(50);"b";TAB(60);
860 IF AA¥ ="LC" THEN PRINT"c" ELSE PRINT" "
870 FOR I=1 TO N1
880 PRINT I;TAB(10);A¥(20,I);
890 PRINT TAB(32);E(I);TAB(39);B(I);TAB(49);D(I);TAB(59);
900 IF AA¥ ="LC" THEN PRINT F(I) ELSE PRINT" "
910 II¥=INKEY¥
```

```
920 IF JJ¥="E "OR JJ¥="c" THEN GOSUB 3500
930 IF JJ¥=" "GOTO 910
940 NEXT I
950 SCREEN 1
960 COLOR 5,7
970 CLS
980 FOR I=0 TO 300
990 READ C(I)
1000 NEXT I
1010 FOR I=310 TO 690 STEP 10
1020 READ C(I)
1030 NEXT I
1040 FOR I=301 TO 689
1050 A=10*INT(I/10)
1060 C(I)=C(A)+(I-A)*(C(A+10)-C(A))/10
1070 NEXT I
1080 COLOR 8,7
1090 LOCATE 5,12
1100 PRINT"峰态偏斜度";
1110 INPUT T
1120 M=0
1130 N=0
1140 FOR I=2.5 TO -22.5 STEP -.1
1150 M=M+1
1160 N=M-1
1170 B=100*(I+1/T)
1180 Y=I/T+1/T/T/2
1190 A(N)=EXP(Y)/T
1200 IF B<0 GOTO 1230
1210 IF B=<690 THEN C=C(B) ELSE C=0
1220 GOTO 1240
1230 IF-B<=690 THEN C=1-C(-B) ELSE C=1
1240 A(N)=A(N)*C
1250 NEXT I
1260 CLS
1270 LOCATE 5,8
1280 IF AA¥="GC" THEN PRINT"柱温"; ELSE PRINT"强溶剂浓度";
1290 PRINT"范围及步度";
1300 INPUT TT0,TT1,TT2
1310 IF TT1<TT0 THEN SWAP TT1,TT0
1320 LOCATE 7,12
1330 COLOR 5,7
1340 PRINT"可容许K3值";
1350 INPUT KK
```

```
1360  W=0
1370  FOR TT=TT1 TO TT0 STEP -TT2
1380  GOSUB 1630
1390  IF K3>=KK THEN 2340
1400  W=W+1
1410  K4(W)=K3
1420  NEXT TT
1430  Y=1
1440  A=K4(1)
1450  FOR I=2 TO W
1460  IF A>K4(I) THEN 1490
1470  Y=I
1480  A=K4(I)
1490  NEXT I
1500  IF A>.01 GOTO 1580
1510  FOR I=1 TO 10000
1520  NEXT I
1530  SCREEN 1
1540  COLOR 4,7
1550  LOCATE 3,6
1560  PRINT"在所给条件范围内,均存在多重峰.请改变条件或改换色谱系统再试."
1570  END
1580  TT=TT1-TT2*(Y-1)
1590  GOSUB 1630
1600  LOCATE 7,40
1610  PRINT"(推荐条件)";
1620  GOTO 2370
1630  FOR I=1 TO N1
1640  IF AA¥="GC" THEN A=B(I)+D(I)/(TT+273.16) ELSE A=B(I)+D(I)*LOG(TT)-
      F(I)*TT
1650  K(I)=EXP(A)
1660  NEXT I
1670  FOR I=1 TO N1-1
1680  FOR J=I+1 TO N1
1690  IF K(I)<K(J) THEN 1760
1700  SWAP A¥(20,I),A¥(20,J)
1710  SWAP K(I),K(J)
1720  SWAP B(I),B(J)
1730  SWAP D(I),D(J)
1740  SWAP E(I),E(J)
1750  SWAP F(I),F(J)
1760  NEXT J,I
1770  FOR I=0 TO 10000
1780  P(I)=0
```

```
1790  NEXT I
1800  X   2.24-.64*T
1810  FOR I   1 TO N1
1820  GOSUB 3000
1830  NEXT I
1840  A=P(1)
1850  FOR I=2 TO 10000
1860  IF A<P(I) THEN A=P(I)
1870  NEXT I
1880  SCREEN 2
1890  FOR I   1 TO 10000
1900  P(I)=90*P(I)/A
1910  NEXT I
1920  CLS
1930  LOCATE 6,9
1940  PRINT"0";TAB(75);
1950  IF K(N1)>=1 THEN PRINT"k";
1960  IF K(N1)<.9 AND K(N1)>   .1 THEN PRINT".1*K";
1970  LOCATE 7,1
1980  IF AAY   "GC" THEN PRINT"柱温:";TT;"c";ELSE PRINT"强溶剂浓度:"INT(10000*TT+.5)/
      100;"%";
1990  LINE(0,91)-(639,91)
2000  IF K(N1)>.9 THEN GOSUB 3100 ELSE GOSUB 3180
2010  IF K(N1)   >10 THEN GOSUB 3250
2020  FOR I=1 TO N1-1
2030  A =1E+12
2040  YY-1000+8000*K(I)/K(N1)
2050  FOR J=1000+8000*K(I)/K(N1) TO 1000+8000*K(I+1)/K(N1)
2060  IF P(J)   0 GOTO 2100
2070  IF A<P(J) THEN 2100
2080  YY=J
2090  A   P(J)
2100  NEXT J
2110  A2=P(999+8000*K(I)/K(N1)
2120  FOR J=1000+8000*K(I)/K(N1) TO YY
2130  IF P(J)>A2 THEN A2=P(J)
2140  NEXT J
2150  A1=P(999+8000*K(I+1)/K(N1))
2160  FOR J   1000+8000*K(I+1)/K(N1) TO YY STEP -1
2170  IF P(J)>A1 THEN A1=P(J)
2180  NEXT J
2190  IF A2<A1 THEN K3(I)=1-A/A2 ELSE K3(I)=1-A/A1
2200  NEXT I
2210  K3   1
```

```
2220  FOR I=1 TO N1-1
2230  IF K3>K3(I) THEN K3=K3(I)
2240  NEXT I
2250  IF K3<0 THEN K3=0
2260  M1=1
2270  A=.0639
2280  PRINT "K3 min=";INT(100*K3+.5)/100
2290  FOR I=1 TO 9984 STEP 15.65
2300  LINE(A*(I-1),90-P(I-1))-(A*I,90-P(I+15.65))
2310  NEXT I
2320  BEEP
2330  RETURN
2340  LOCATE 7,40
2350  PRINT"最佳条件";
2360  GOSUB 3850
2370  JJ¥=INKEY¥
2380  Y=Y+1
2390  IF JJ¥="s" OR JJ¥="S" THEN END
2400  IF JJ¥="k" OR JJ¥="K" THEN 3650
2410  IF JJ¥="m" OR JJ¥="M" THEN 2460
2420  IF JJ¥="P" OR JJ¥="p" THEN GOSUB 3320
2430  IF JJ¥="d" OR JJ¥="D" GOTO 2690
2440  IF Y=100*INT(Y/100) THEN BEEP
2450  GOTO 2370
2460  CLS
2470  LOCATE 5,20
2480  INPUT "放大倍数";M
2490  M1=M1*M
2500  FOR I=1 TO 10000
2510  P(I)=M*P(I)
2520  NEXT I
2530  CLS
2540  LOCATE 6,9
2550  PRINT"0";TAB(74);
2560  IF K(N1)>.9 THEN GOSUB 3100 ELSE GOSUB 3180
2570  IF K(N1)>=10 THEN GOSUB 3250
2580  IF K(N1)>.9 THEN PRINT"k" ELSE PRINT".1*k";
2590  LOCATE 7
2600  IF AA¥="LC"GOTO 2650
2610  PRINT"柱温:";TT;"c";TAB(20);"放大倍数:";M1;
2620  LINE(0,91)-(639,91)
2630  GOSUB 2280
2640  GOTO 2370
2650  PRINT"强溶剂浓度:";INT(10000*TT+.5)/100;"%";TAB(20);"放大倍数:";M1;
```

```
2660  LINE (0,91)-(639,91)
2670  GOSUB 2280
2680  GOTO 2370
2690  CLS
2700  LOCATE 5,20
2710  INPUT"展宽范围(k ):";D1,D2
2720  CLS
2730  LOCATE 6
2740  PRINT "k=";D1;TAB(70);"k=";D2
2750  LINE(0,91)-(639,91)
2760  I1=1000+8000*D1/K(N1)
2770  I2=1000+8000*D2/K(N1)
2780  FOR I=I1 TO I2
2790  IF I>9998 GOTO 2830
2800  LINE(639*(I-I1)/(I2-I1),90-P(I))-(639*(I+1-I1)/(I2-I1),90-P(I+1))
2810  NEXT I
2820  BEEP
2830  LOCATE 7
2840  IF AA¥="LC"GOTO 2870
2850  PRINT"柱温:";TT;"c";TAB(20);"显示范围 k 从";D1;"到";D2;
2860  GOTO 2370
2870  PRINT"强溶剂浓度:";INT(10000*TT+.5)/100;"%";TAB(20);"显示范围 k 从";D1;"到";D2;
2880  GOTO 2370
2890  DATA .5,.496,.492,.488,.484,.4801,.4761,.4721,.4681,.4641,.4602,.4562,.4522,.4483,
      .4443,.4404,.4364,.4325,.4286,.4247,.4207,.4168,.4129,.409,.4052,.4013,.3974,.3936,
      .3897,.3859,.3821,.3783,.3745,.3707,.3669,.3632,.3594,.3557,.352,.3483,.3446,.3409
2900  DATA .3372,.3336,.33,.3264,.3228,.3192,.3156,.3121,.3085,.305,.3015,.2981,.2946,
      .2912,.2877,.2843,.281,.2776,.2743,.2709,.2676,.2643,.2611,.2578,.2546,.2514,.2483,
      .2451,.242,.2389,.2358,.2327,.2296,.2266,.2236,.2206,.2177,.2148,.2119,.209
2910  DATA.2061,.2033,.2005,.1977,.1949,.1922,.1894,.1867,.1841,.1814,.1788,.1762,.1736,
      .1711,.1685,.166,.1635,.1611,.1587,.1562,.1539,.1515,.1492,.1469,.1446,.1423,.1401,
      .1379,.1357,.1335,.1314,.1292,.1271,.1251,.123,.121,.119,.117,.1151,.1131
2920  DATA .1112,.1093,.1075,.1056,.1038,.102,.1003,.0985,.0968,.0951,.0934,.0918,.0901,
      .0885,.0869,.0853,.0838,.0823,.0808,.0793,.0778,.0764,.0749,.0735,.0721,.0708,.0694,
      .0681,.0668,.0655,.0643,.063,.0618,.0606,.0594,.0582,.0571,.0559,.0548,.0537
2930  DATA .0526,.0516,.0505,.0495,.0485,.0475,.0465,.0455,.0446,.0436,.0427,.0418,.0409,
      .0401,.0392,.0384,.0375,.0367,.0359,.0351,.0344,.0336,.0329,.0322,.0314,.0307,.0301,
      .0294,.0287,.0281,.0274,.0268,.0262,.0256,.025,.0244,.0239,.0233,.0228,.0222
2940  DATA .0217,.0212,.0207,.0202,.0197,.0192,.0188,.0183,.0179,.0174,.017,.0166,.0162,
      .0158,.0154,.015,.0146,.0143,.0139,.0136,.0132,.0129,.0125,.0122,.0119,.0116,.0113,
      .011,.0107,.0104,.0102,.0099,.00964,.00939,.00914,.00889,.00866,.00842
2950  DATA .0082,.00798
2960  DATA .00776,.00755,.00734,.00714,.00695,.00676,.00657,.00639,.00621,.00604,.00587,
      .0057,.00554,.00539,.00523,.00508,.00494,.0048,.00466,.00453,.0044,.00427,.00415,
```

```
     00402,.00391,.00379,.00368,.00357,.00347,.00336,.00326,.00317,.00307,.00298,.00289
2970 DATA .0028,.00272,.00264,.00256,.00248,.0024,.00233,.00226,.00219,.00212,.00205,
     .00199,.00193,.00187,.00181,.00175,.00169,.00164,.00159,.00154,.00149,.00144,.00139,
     .00135
2980 DATA 9.68E-4,6.87E-4,4.83E-4,3.37E-4,2.33E-4,1.59E-4,1.08E-4,7.23E-5,4.81E-5,3.17E-5,
     2.07E-5,1.33E-5,8.54E-6,5.41E-6,3.4E-6,2.11E-6,1.3E-6,7.93E-7,4.79E-7,2.87E-7,1.7E-7,
     9.96E-8,5.79E-8,3.33E-8,1.9E-8,1.07E-8,5.99E-9,3.32E-9,1.82E-9
2990 DATA 9.87E-10,5.3E-10,2.82E-10,1.49E-10,7.77E-11,4.02E-11,2.06E-11,1.04E-11,5.23E-12,
     2.6E-12
3000 C=.01+.02*K(I)
3010 S=8000*K(I)/K(N1)+1000-5000*T*C/K(N1)/X
3020 N=-1
3030 M=K(N1)*X/C/800
3040 FOR J=S-20000!*C/X/K(N1) TO S+180000!*C/X/K(N1)
3050 IF J>10000 GOTO 3090
3060 N=N+1
3070 P(J)=P(J)+A(N*M)/X/C*E(I)
3080 NEXT J
3090 RETURN
3100 X=8000/K(N1)
3110 N=-1
3120 FOR I=1000 TO 10000 STEP X
3130 N=N+1
3140 PSET((1000+N*X)*.0639,92)
3150 PSET((1000+N*X)*.0639,93)
3160 NEXT I
3170 RETURN
3180 X=8000/K(N1)
3190 N=-1
3200 FOR I=1000 TO 10000 STEP .1*X
3210 N=N+1
3220 PSET((1000+N*.1*X)*.0639,92)
3230 NEXT I
3240 RETURN
3250 X=8000/K(N1)
3260 N=-1
3270 FOR I=1000 TO 10000 STEP 10*X
3280 N=N+1
3290 PSET((1000+N*10*X)*.0639,94)
3300 NEXT I
3310 RETURN
3320 CLS
3330 SCREEN 1
3340 COLOR 1,7
```

```
3350  LOCATE 3,6
3360  PRINT"文件名";
3370  INPUT A¥
3380  A(0)  TT
3390  OPEN "a¥" FOR OUTPUT AS #1
3400  FOR I = 0 TO 10000
3410  WRITE #1,A(I)
3420  NEXT I
3430  CLOSE #1
3440  LOCATE 5,6
3450  PRINT"文件已存入磁盘"
3460  FOR I=1 TO 10000
3470  NEXT I
3480  SCREEN 2
3490  RETURN
3500  PRINT TAB(4);"组分编号";
3510  INPUT A
3520  PRINT TAB(4);"请输入化合物名称,含量以及方程"
3530  PRINT TAB(6);"ln k=a+b";
3540  IF AA¥="LC" GOTO 3600
3550  PRINT"/T"
3560  PRINT"之系数";
3570  PRINT TAB(10);
3580  INPUT A¥(20,A),E(A),B(A),D(A)
3590  RETURN
3600  PRINT"ln CB+cCB"
3610  PRINT"之系数";
3620  PRINT TAB(10);
3630  INPUT A¥(20,A),E(A),B(A),D(A),F(A)
3640  RETURN
3650  CLS
3660  FOR I=1 TO N1
3670  V  CSRLIN
3680  IF V<10 THEN 3750
3690  FOR Y=0 TO 639 STEP 3
3700  PSEY(Y,199)
3710  NEXT Y
3720  JJ¥ - INKEY¥
3730  IF JJ¥  " "THEN 3720
3740  CLS
3750  PRINT I;A¥(20,I);":";INT(100*K(I)+.5)/100
3760  NEXT I
3770  FOR I  0 TO 639 STEP 3
3780  PSET(I,199)
```

```
3790  NEXT I
3800  JJ¥=INKEY¥
3810  IF JJ¥ ="" GOTO 3800
3820  CLS
3830  GOSUB 3850
3840  GOTO 2370
3850  LOCATE 9,25
3860  PRINT"键 功 能"
3870  PRINT" D:展宽   K:显示各组分的容量因子   M:放大   S:停止";
3880  RETURN
```

【程序 12-12】 烷烃类化合物双柱换算程序($I^{\text{SQ}}_{T,(M)} \Rightarrow I^{P}_{T,(M)}$)

```
10  REM It is. used for calculating Retention Index of OV-101 at any Column. Temp. from Retention Index
    of Squalane at 50 degree as standard.
15  REM The experiment values of OV-101 in this program are used for determining the parameters of the e-
    quation which use to calculating RI of OV-101.
20  DIM A(68),B(68),C(4,5),X(4),Y(68)
30  PRINT TAB(20);"TWO-COLUMN RETENTION INDEX"
40  PRINT
50  PRINT TAB(10);"STATIONARY PHASE:OV-101",
60  PRINT TAB(10);"DATA FROM:Our laboratory".
70  PRINT TAB(10);"COLUMN TEMPERATURE",
80  INPUT W
90  W=W-50
100  PRINT TAB(10);"TEMP.COEF:TH(i. e. THEORY) OR REAL",
110  INPUT T¥
120  R=68
130  FOR I=1 TO R
140  READ A(I)
150  NEXT I
160  FOR I=1 TO R
170  READ B(I)
180  GOSUB 1050
190  A(I)=A(I)+A*W
200  NEXT I
210  FOR I=0 TO 4
220  FOR K=0 TO 5
230  C(I,K)=0
240  NEXT K
250  NEXT I
260  FOR I=1 TO R
270  READ Y(I)
280  IF Y(I)=0 GOTO 520
290  GOSUB 1050
300  A=100*M-A(I)
```

```
310  Y=Y(I)-A(I)
320  C(0,0)=C(0,0)+A*A
330  C(0,1)=C(0,1)+A*P
340  C(0,2)=C(0,2)+A*Q
350  C(0,3)=C(0,3)+A*S
360  C(0,4)=C(0,4)+A*T
370  C(0,5)=C(0,5)+A*Y
380  C(1,1)=C(1,1)+P*P
390  C(1,2)=C(1,2)+Q*P
400  C(1,3)=C(1,3)+S*P
410  C(1,4)=C(1,4)+T*P
420  C(1,5)=C(1,5)+P*Y
430  C(2,2)=C(2,2)+Q*Q
440  C(2,3)=C(2,3)+S*Q
450  C(2,4)=C(2,4)+T*Q
460  C(2,5)=C(2,5)+Q*Y
470  C(3,3)=C(3,3)+S*S
480  C(3,4)=C(3,4)+S*T
490  C(3,5)=C(3,5)+Y*S
500  C(4,4)=C(4,4)+T*T
510  C(4,5)=C(4,5)+Y*T
520  NEXT I
530  FOR I=1 TO 4
540  FOR K=0 TO I-1
550  C(I,K)=C(K,I)
560  NEXT K
570  NEXT I
580  FOR I=0 TO 3
590  FOR J=I+1 TO 4
600  FOR K=I+1 TO 5
610  C(J,K)=C(J,I)/C(I,I)*C(I,K)-C(J,K)
620  NEXT K
630  NEXT J
640  NEXT I
650  X(4)=C(4,5)/C(4,4)
660  FOR I=3 TO 0 STEP -1
670  LET X(I)=0
680  FOR J=4 TO I+1 STEP-1
690  X(I)=X(I)+C(I,J)*X(J)
700  NEXT J
710  X(I)=(C(I,5)-X(I))/C(I,I)
720  NEXT I
730  PRINT
740  PRINT TAB(5);"T(Calc.)=IS+";X(0);"(100M-IS)+"
```

```
750  PRINT TAB(15);X(1);"M2 + ";X(2);"M3 + ";X(3);"M4 + . . . +";X(4);"E3 + . . ."
760  PRINT
770  PRINT TAB(3);"NO. ";TAB(10);"COMPD. ";TAB(29);"IS";TAB(38);"T(Exp.)";
780  PRINT TAB(48);"T(Calc.)";TAB(60);"E";TAB(68);"G"
790  RESTORE
800  PRINT
810  FOR I=1 TO R
820  READ A,A,A
830  NEXT I
840  B=0
850  F=0
860  G=0
870  FOR I=1 TO R
880  READ Z¥
890  GOSUB 1050
900  X=A(I)+X(0)*(100*M-A(I))+X(1)*P-X(2)*Q+X(3)*S+X(4)*T
910  IF Y(I)>10 GOTO 940
920  PRINT TAB(2);I;TAB(8);Z¥;TAB(27);INT(10*A(I)-.5)/10;TAB(47);INT(10*X+.5)/10;
930  GOTO 1000
940  F=F+1
950  PRINT TAB(2);I;TAB(8);Z¥;TAB(27);INT(10*A(I)+.5)/10;TAB(37);Y(I);
960  PRINT TAB(47);INT(10*X+.5)/10;
970  PRINT TAB(59);INT(10*(Y(I)-X)-.5)/10;
980  B=B+(Y(I)-X)^2
990  G=G+ABS(Y(I)-X)
1000  PRINT TAB(67);INT(B(I))
1010  NEXT I
1020  PRINT
1030  PRINT,"S.D=";SQR(B/F),"A.E=";G/F
1040  GOTO 1540
1050  M=INT(B(I))-10*INT(B(I)/10)
1060  T=INT(B(I)/100001)
1070  S=INT(B(I)/10001)-10*T
1080  Q=INT(B(I)/100)-100*T-10*S
1090  P=INT(B(I)/10)-10001*T-100*S-10*Q
1100  IF T¥="TH" GOTO 1130
1110  A=B(I)-INT(B(I))
1120  GOTO 1140
1130  A=(3.938*P+6.571*Q-3.511*S-10.3759*T)/100
1140  RETURN
1160  DATA 500.0,536.8,567.6,569.6,584.3,600.0,623.8,629.8,640.0
1170  DATA 659.0,666.7,671.8,676.3,686.2,690.2,700.0,719.6,726.7
1180  DATA 728.5,732.1,737.3,743.8,752.6,759.8,760.1,761.6,764.9,767.2
1190  DATA 770.9,772.5,772.7,773.1,774.4,776.7,789.5,800.0
```

```
1200  DATA 808.2,812.4,815.8,820.1,821.5,821.8,822.2,824.3,827.2,827.6
1210  DATA 832.9,833.7,836.1,836.4,840.0,843.7,849.1,852.4,853.1,853.5
1220  DATA 854.8,854.8,857.5,858.4,858.9,863.0,864.7,866.9,870.3,872.3
1230  DATA 877.6,900.0
1250  DATA 5.0,26.083,26.103,16.013,106.050,6.0,27.070,27.035,37.140
1260  DATA 207.138,17.015,117.095,107.026,10007.065,38.113,7.0
1270  DATA 28.055,48.245,28.038,118.065,128.163,208.135,128.150
1280  DATA 218.220,118.065,10018.138,18.028,1008.025,208.108,108.028
1290  DATA 10008.055,49.190,10108.205,39.065,129.135,8.0
1300  DATA 219.160,129.085,29.045,139.225,1019.008,129.150,10029.210
1310  DATA 10019.055,29.025,2009.115,119.030,209.055,209.115,10029.180
1320  DATA 219.185,10019.105,219.215,229.265,309.213,10109.175
1330  DATA 10109.155,119.065,10009.045,1109.093,229.265,1009.030
1340  DATA 19.015,10009.045,109.035,10119.270,20009.290,9.0
1350  REM Data from 1360-1420 are our experiment retention index of OV-101 at 50 degree.
1360  DATA 500,537,566.7,569.5,584.4,600,625,629.1,637.7,656.6
1370  DATA 667.6,670.2,676.3,686.7,689.3,700,722.1,724,0,732.4
1380  DATA 734.1,0,750.1,754.5,760.3,761.9,766.1,767.5,769.4,773.5
1390  DATA 774.6,773.5,774.6,777.7,789.8,800,807.9,811.8,817.9,817.9
1400  DATA 823.3,819.2,823.3,826.4,828.5,828.5,833.5,833.5,835.7
1410  DATA 835.7,838,7.845.5,845.5,848.1,850,853.7,854.8,853.7,859
1420  DATA 855.8,855.8,864.1,865.1,0,871.6,871.6,0,900
1430  DATA NC5,2.2M2C4,2.3M2C4,2MC5,3MC5,NC6,2.2M2C5,2.4M2C5
1440  DATA 2.2.3M3C4,3.3M2C5,2MC6,2.3M2C5,3MC6,3EC5,2.2.4M3C5,NC7
1450  DATA 2.2M2C6,2.2.3.3M4C4,2.5M2C6,2.4M2C6,2.2.3M3C5,3.3M2C6
1460  DATA 2.3.4M3C5,2.3.3M3C5,2.3M2C6,2M3EC5,2MC7,4MC7
1470  DATA 3.4M2C6,3MC7.3EC6,2.2.4.4M4C5,3M3EC5
1480  DATA 2.2.5M3C6,2.2.4M3C6,NC8
1490  DATA 2.4.4M3C6,2.3.5M3C6,2.2M2C7,2.2.3.4M4C5,2.4M2C7,2.2.3M3C6
1500  DATA 2.2M2.3EC5,2M4EC6,2.6M2C7,4.4M2C7,2.5M2C7,3.5M2C7
1510  DATA 3.3M2C7,2.4M2.3EC5,2.3.3M3C6,2M3EC6,2.3.4M3C6
1520  DATA 2.2.3.3M4C5,3.3.4M3C6,3M3EC6,3M4EC6,2.3M2C7,4EC7,3.4M2C7
1530  DATA 2.3.3.4M4C5,4MC8,2MC8,3EC7,3MC8,2.3M2.3EC5,3.3E2C5,N9
1540  END
```

【程序 12-13】 环烷烃类化合物双柱换算程序($I^{\text{鲨}}_{T,(M)} \Rightarrow I^{P}_{T,(M)}$)

```
10  REM It is used for calculating retention index of giving stationary phase at column T from our experi-
    mental data RI of Squalane at 50 degree as standard.
20  REM Now the giving stationary is OV-101. We calculate first the parameters from exp. data of Squalane
    & OV-101, then use the equ. calulating RI of OV-101.
30  DIM A(39),B(39),C(39),D(39),E(39),N(39)
40  J  39
50  A=0: B=0: C=0: D=0: E=0: F=0: G=0
60  PRINT TAB(20);"TWO-COLUMN RETENTION INDEX"
70  PRINT
```

```
80 PRINT TAB(20);"STATIONARY PHASE;OV-101"
90 PRINT TAB(20);"DATA FROM Our"
100 PRINT TAB(20);"COLUMN TEMPERATURE:";
110 INPUT T
120 T T-50
130 PRINT TAB(20);"TEMP.COEF.: TH (i.e. Theory)OR REAL:";
140 INPUT A¥
145 REM The result which use CC5 & CC6 separately is butter then CC56.
150 PRINT TAB(20);"CC5,CC6 OR CC56";
160 INPUT B¥
170 PRINT
180 PRINT
190 FOR I- 1 TO J
200 READ A(I)
210 NEXT I
220 FOR I=1 TO 39
230 READ E(I)
240 NEXT I
250 FOR I 1 TO J
260 READ B(I),X
270 N(I)=INT(X/10)
280 X=X-10*N(I)
290 IF A¥="TH" GOTO 320
300 B(I) B(I) E(I)*T/10
310 GOTO 340
320 IF X -5 THEN B(I)=B(I)+(.138+.024*N(I))*T
330 IF X=6 THEN B(I)=B(I)+(.208+.039*N(I))*T
340 C(I)=B(I)
350 D(I) A(I)
360 IF X=6 THEN C(I)=B(28)
370 IF X=6 THEN D(I)=A(28)
380 NEXT I
390 FOR I= 1 TO J
400 IF A(I)=0 GOTO 480
410 IF B¥="CC5" THEN IF I>27 GOTO 480
420 IF B¥="CC6" THEN IF I<28 GOTO 480
430 A=A+(A(I)-D(I))*(B(I)-C(I))
440 B=B+(A(I)-D(I))*N(I)
450 C=C+(B(I)-C(I))^2
460 D=D+(B(I)-C(I))*N(I)
470 E=E+N(I)^2
480 NEXT I
490 K1=(A*E-B*D)/(C*E-D*D)
500 K2=(C*B-A*D)/(C*E-D*D)
```

```
510 PRINT TAB(10);"I'(Calc.)=I0'+";K1;"(IS-I0)+";K2;"N"
520 PRINT
530 PRINT TAB(5);"NO.";TAB(15);"COMPD.";TAB(35);"IS";
540 PRINT TAB(44);"I'(Exp.)";TAB(54);"I'(Calc.)";TAB(65);"E"
550 PRINT
560 N=0
570 FOR I=1 TO J
580 READ A¥
590 IF B¥="CC5" THEN IF I>27 GOTO 720
600 IF B¥="CC6" THEN IF I<28 GOTO 720
610 X=D(I)+K1*(B(I)-C(I))+K2*N(I)
620 X=INT(10*X+.5)/10
630 PRINT TAB(4);I;TAB(9);A¥;TAB(33);INT(10*B(I)+.5)/10;
640 IF A(I)=0 GOTO 710
650 I1=A(I)-X
660 G=G+ABS(I1)
670 F=F+I1^2
680 N=N+1
690 PRINT TAB(43);A(I);TAB(53);X;TAB(64);INT(10*I1+.5)/10
700 GOTO 720
710 PRINT TAB(53);X
720 NEXT I
730 PRINT
740 PRINT,"S.D=";SQR(F/N),,"A.E=";G/N
750 REM The DATA of 760-800 are our experimental retention index fo OV-101 at 50 degree.
760 DATA 566.2,629.1,732.4,674,716.7,689.3,684,686.7,823.3,807.9
770 DATA 789.8,814,786.2,786.2,786.2,815.9,788.3,783.2,786.2,761.9
780 DATA 724,800,776.1,747.5,773.5,769.4,740.5
790 DATA 661.2,722.1,829.5
800 DATA 0,823.3,794.6,776.1,800,800,777.7,874.8,831.6
820 DATA 1.38,1.55,2.08,1.78,2.25,1.5,1.45,1.68,2,2.65,2.5,2.43,2.18,1.8
830 DATA 2.1,2.48,1.9,1.83,2,1.73,2.03,2.8,2.08,1.58,2.1,2.2,1.65,2.08
840 DATA 2.63,2.85,3.13,3,2.87,2.45,2.63,2.95,2.75,3.8,2.8
860 DATA 565.9,5,628.4,15,734.2,25,674.2,25,721.4,25,689.8,25,683.1,25
870 DATA 687.2,25,830.6,35,812.6,35,794.7,35,821.3,35,790.9,35,791.4,35
880 DATA 790.2,35,821.4,35,791.6,35,788.3,35,790.7,35,763.8,35,723.7,35
890 DATA 802.6,35,779.5,35,748,35,776.2,35,773.4,35,741.5,35,663.5,6
900 DATA 726.3,16,834.4,26,787.2,26,829.6,26,801.8,26,785.4,26,805.8,26
910 DATA 805.2,26,785.9,26,883.7,36,840.8,36
920 DATA CC5,MCC5,ECC5,1.1M2CC5,1.C-2-M2CC5,1.T-2-M2CC5,1.C-3-M2CC5
930 DATA 1.T-3-M2CC5,PCC5,IPCC5,1-M-1ECC5,1-M-C-2-ECC5
940 DATA 1-M-T-2-ECC5,1-M-C-3-ECC5,1-M-T-3-ECC5,1-E-C-2-MCC5
950 DATA 1-E-T-2-MCC5,1-E-C-3-MCC5,1-E-T-3-MCC5,1.1.2M3CC5,1.1.3M3CC5
960 DATA 1.C-2.C-3-M3CC5,1.C-2.T-3-M3CC5,1.T-2.C-3-M3CC5
```

```
970  DATA 1.C-2.C-4-M3CC5,1.C-2.T-4-M3CC5,1.T-2.C-4-M3CC5,CC6,MCC6,ECC6
980  DATA 1.1M2CC6,1.C-2-M2CC6,1.T-2-M2CC6,-1.C-3-M2CC6,1.T-3-M2CC6
990  DATA 1.C-4-M2CC6,1.T 4-M2CC6,1.1.2M3CC6,1.1.3M3CC6
1000  END
```

【程序 12-14】 烷基苯类化合物双柱换算程序($I^{99}_{T,(M)} \Rightarrow I^{P}_{T,(M)}$)

```
10  REM It is used for calculating retention index of give stationary phase at any temperature from our RI of
    Squalane at 50 degree as standard.
20  REM Now the give stationary phase is OV-101. We calcutate parameters from exrerimental RI of OV
    101 & Squalane,Then calculate all OV-101 RI from equ.
30  D=0 :G=0
40  DIM A(3,4),X(3),B(11),C(11),D(11),W(11),N(11),Y(11)
50  PRINT TAB(20);"TWO-COLUMN RETENTION INDEX"
60  PRINT
70  PRINT TAB(10);"STATIONARY PHASE;OV-101"
80  PRINT TAB(10);"DATA FROM:Our"
90  PRINT TAB(10);"COLUMN TEMPERATURE:";
100  INPUT T
110  T=T-50
120  PRINT TAB(10);"TEMP. COEF. TH(i.e.Theory) or REAL",
130  INPUT F¥
140  H=11
150  FOR I=1 TO H
160  READ B(I)
170  NEXT I
180  FOR I=1 TO H
190  READ C(I)
200  NEXT I
210  FOR I=1 TO H
220  READ D
230  IF F¥="TH" GOTO 250
240  B(I)=B(I)+T*D
250  NEXT I
260  FOR I=1 TO H
270  READ A
280  N(I)=INT(A/100)
290  W(I)=INT(A/100)-10*N(I)
300  Y(I)=A-10*W(I)-100*N(I)
310  IF F¥="REAL" GOTO 330
320  B(I)=B(I)+T*(.24-.000838*N(I)+.01316*W(I))
330  NEXT I
340  FOR I=0 TO 3
350  FOR J=0 TO 4
360  A(I,J)=0
370  NEXT J
```

```
380  X(I)=0
390  NEXT I
400  FOR I=1 TO H
410  IF C(I)=0 GOTO 580
420  B=B(I)-B(1)
430  A=C(I)-C(1)
440  A(0,0)=A(0,0)+B*B
450  A(0,1)=A(0,1)+B*N(I)
460  A(0,2)=A(0,2)+B*W(I)
470  A(0,3)=A(0,3)+Y(I)*B
480  A(0,4)=A(0,4)+B*A
490  A(1,1)=A(1,1)+N(I)^2
500  A(1,2)=A(1,2)+N(I)*W(I)
510  A(1,3)=A(1,3)+N(I)*Y(I)
520  A(1,4)=A(1,4)+N(I)*A
530  A(2,2)=A(2,2)+W(I)^2
540  A(2,3)=A(2,3)+W(I)*Y(I)
550  A(2,4)=A(2,4)+W(I)*A
560  A(3,3)=A(3,3)+Y(I)^2
570  A(3,4)=A(3,4)+Y(I)*A
580  NEXT I
590  FOR I=0 TO 3
600  FOR J=0 TO I-1
610  A(I,J)=A(J,I)
620  NEXT J
630  NEXT I
640  FOR I=0 TO 2
650  FOR J=I+1 TO 3
660  FOR K=I+1 TO 4
670  A(J,K)=A(J,I)/A(I,I)*A(I,K)-A(J,K)
680  NEXT K
690  NEXT J
700  NEXT I
710  LET X(3)=A(3,4)/A(3,3)
720  FOR I=2 TO 0 STEP-1
730  X(I)=0
740  FOR J=3 TO I-1 STEP-1
750  X(I)=X(I)+A(I,J)*X(J)
760  NEXT J
770  X(I)=(A(I,4)-X(I))/A(I,I)
780  NEXT I
790  PRINT TAB(2);"T(Calc.)=";C(1);"+";X(0);"(IS-";B(1);")+";X(1);"N";
800  PRINT"-";X(2);"W-";X(3);"Y"
810  PRINT
```

```
820  PRINT
830  PRINT TAB(2);"NO. ";TAB(10);"COMPD. ";TAB(30);"IS";TAB(39);"T(Exp.)";
840  PRINT TAB(49);"T(Calc.)";TAB(62);"E"
850  PRINT
860  T  0
870  FOR I=1 TO H
880  PEAD AY
890  A  C(I)-X(0)*(B(I)-B(1))+X(1)*N(I)+X(2)*W(I)+X(3)*Y(I)
900  B(I)=INT (10*B(I)+.5)/10
910  IF C(I)=0 GOTO 990
920  B=C(I)-A
930  D=B*B+D
940  G=G+ABS(B)
950  T  T+1
960  PRINT TAB(1);I;TAB(6);AY;TAB(28);B(I);TAB(38);C(I);TAB(48);
970  PRINT INT(10*A  .5)/10;TAB(61);INT(10*B-.5)/10
980  GOTO 1000
990  PRINT TAB(1);I;TAB(6);AY;TAB(28);B(I);TAB(48);INT(10*A+.5)/10
1000  NEXT I
1010  PRINT
1020  PRINT,"S.D=";SQR(D/T),,"A.D=";G/T
1040  DATA 636.8,744.2,833.7,848.4,850.4,868.8
1050  DATA 893,922.5,957.1,971.1,996.2
1060  REM DATA of 1070 is our experimental RI of OV-101 at 50 degree.
1070  DATA 652.7,751.5,845.5,853.7,853.7,874.8,0,0,0,0,0
1090  DATA .239,.239,.253,.239,.236,.272
1100  DATA .26,.24,.19,.28,.28
1120  DATA 0,111,211,202,212,232,311,311,303,313,343
1130  DATA BENZENE,ME-BENZENE,ET-BENZENE,1,4-DI-ME-BENZENE
1140  DATA 1,3-DI-ME-BENZENE,1,2-DI-ME-BENZENE
1150  DATA iso-PROP-BENZENE,n-PROP-BENZENE,1,3,5-TRI-ME-BENZENE
1160  DATA 1,2,4-TRI-ME-BENZENE,1,2,3-TRI-ME-BENZENE
1170  END
```

参 考 文 献

1 卢佩章，卢小明．色谱，1984；1：58

2 卢佩章，卢小明．色谱，1984；1：102

3 DuPont's Sentinel. Amer Lab, 1982; June; 15

4 Dessy R E. Anal Chem, 1984; 56; 1200A

5 Kamicky J. Anal Chem, 1984; 56; 1312A

6 "Expert System in HPLC". Anal Chem, 1986; 58; 1192A

7 Bach R. In Pierce T H, Hohne R A, ed. Artificial Intelligence Application in Chemistry. York PA: Maple Press, 1986; 297

8 Schoenmakers P J, Mulholland M. Chromatographia, 1988; 25; 737

9 De Smet M, Peeters A, Buydens L, et al. J Chromatogr, 1988; 457; 25

10 Goulder D, Blaffert T, Blockland A, et al. Chromatographia, 1988; 26: 237
11 Schoenmakers P J, Dunand N, Cleland A, et al. Chromatographia, 1988; 26: 37
12 Van Leeuwen J A, Buydens L M C, Vandeginst, B G M, et al. Trends Anal Chem, 1990; 9 (2): 58
13 Buydens L M C, van Leeuwen J A, Mulholland M, et al. Trends Anal Chem, 1990; 9 (2): 58
14 Lu Peichang, Huang Hongxin. J Chromatogr, 1988; 452: 172
15 Lu Peichang, Lu Xiaoming. in Tang Youqi, ed. Advances in Science of China Chemistry. v1. Beijing: Science Press, 1985: 15
16 Lu Peichang, Li Haochun, Zhang Yukui, et al. Proceedings of 2nd Beijing Conf and Exhib on Instum Analysis, 1987: 807
17 Zhang Yukui, Zou Hanfa, Lu Peichang. Chinese J of Chemistry, 1991; 9 (5): 441
18 许国旺，张玉奎，卢佩章. 分析化学，1993; 21: 276
19 许国旺，张玉奎，卢佩章. 应用化学，1993; 10: 66
20 卢佩章，许国旺. 气相色谱专家系统. 济南：山东科学技术出版社，1994
21 许国旺，卢佩章. 色谱，1990; 8: 270
22 许国旺，卢佩章. 色谱，1990; 8: 345
23 许国旺，李浩春，邸凌等. 色谱，1992; 10: 257
24 李浩春，林炳承，褚新华等. 色谱. 1988; 6: 65
25 林炳承，刘文烨，褚新华等. 色谱，1992; 10: 26
26 Lu Peichang, Lin Bingcheng, Chu Xinhua, et al. HRC & CC, 1986; 9: 702
27 林炳承，卢佩章. 化学学报，1989; 47: 221
28 Zhang Xiangmin, Lu Peizhang. Proceedings of 3rd Beijing Conf and Exhib on Instrum Analysis, 1989: D21
29 许国旺，张玉奎，卢佩章. 化学学报，1994; 52: 902
30 许国旺，张祥民，杨黎. 化学学报，1994; 52: 910
31 李浩春，戴朝政，徐方宝等. 科学通报，1981; 26: 1491
32 Li Haochun, Dai Chaozheng, Xu Fangbao. In Lu Peichang, Bayer E, ed. Proceeding of Sino West Germany Symposium on Chromatography. Beijing: Science Press, 1983: 342
33 Engelhardt H. Chromatographia, 1982; 15: 191
34 Lu Peichang, Li Haochun, Dai Chaozheng. Proceedings of Ist Beijing Conf and Exhib on Instrum Analysis. v2. 1989: 2232
35 戴朝政，且建生，卢佩章等. 色谱，1989; 7: 135
36 李浩春，戴朝政. 色谱，1987; 5: 135
37 李浩春，戴朝政，徐方宝等. 科学通报，1983; 28: 84
38 李浩春，邸凌，张祥民等. 中国科学院大连化学物理研究所资料，1988: (8803284)
39 李浩春，卢佩章. 气相色谱法. 北京：科学出版社，1993
40 李浩春，林彬生，罗春荣等. 中国科学 (B辑)，1986: (5): 449
41 Lin Bingsheng, Li Haichun, Lu Peichang, LC·GC, 1986; 4: 1206
42 赖聪，卢佩章，李浩春. 色谱，1987; 5: 217
43 卢佩章，张玉奎，梁鑫淼. 高效液相色谱法及其专家系统. 沈阳：辽宁科学技术出版社，1992
44 许国旺，杨黎，刘辉等. 色谱，1995; 13: 310
45 陈佼，许国旺，杨黎等. 分析化学，1994; 22: 1029
46 杨黎，许国旺，罗春荣等. 分析测试学报，1995: 14 (1): 10
47 许国旺，张祥民，罗春荣等. 计算机和应用化学，1995; 12: 176
48 Lu Peichang, Zhang Xiangmin, Yang Li, et al. Anal Sci (Japan), 1994; 10: 24
49 杨黎，卢佩章，许国旺. 第九次全国色谱学术报告会文集. 1993: 580
50 杨黎，许国旺，罗春荣等. 色谱，1998; 16:

（洪群发　许国旺）

第二篇 定性、定量用数据选集

第十三章 烃类化合物的保留指数

第一节 烷烃的保留指数

表 13-1 C_5～C_8 烷烃保留指数[1]

固定液：OV-101

I 柱温，°C / 化合物	40	50	60	70	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
正戊烷	500.0	500.0	500.0	500.0	
2,2-二甲基丁烷	535.5	536.7	537.1	537.7	0.70
2,3-二甲基丁烷	565.6	566.1	568.0	569.9	1.48
2-甲基戊烷	569.2	569.3	569.4	569.9	0.22
3-甲基戊烷	583.1	583.8	584.1	584.8	0.54
正己烷	600.0	600.0	600.0	600.0	—
2,2-二甲基戊烷	623.8	624.8	625.1	626.0	0.70
2,4-二甲基戊烷	629.9	630.4	630.9	631.5	0.53
2,2,3-三甲基丁烷	635.4	636.9	638.3	639.8	1.46
3,3-二甲基戊烷	654.7	656.1	657.6	659.2	1.50
2-甲基己烷	667.1	667.4	667.5	667.6	0.16
2,3-二甲基戊烷	668.8	669.7	670.5	671.5	0.89
3-甲基己烷	675.7	676.1	676.4	676.9	0.39
3-乙基戊烷	685.5	686.1	686.6	687.2	0.56
正庚烷	700.0	700.0	700.0	700.0	
2,2-二甲基己烷	721.3	722.0	722.9	723.7	0.81
2,5-二甲基己烷	732.6	732.8	733.0	733.2	0.20
2,4-二甲基己烷	733.4	734.0	734.7	735.4	0.67
2,2,3-三甲基戊烷	733.4	734.3	735.1	735.9	0.83
3,3-二甲基己烷	740.4	741.2	741.8	742.9	0.81
2,3,4-三甲基戊烷	748.4	749.8	751.2	752.7	1.43
2,3-二甲基己烷	759.6	760.2	761.0	761.8	0.74
2-甲基-3-乙基戊烷	760.2	761.5	762.7	763.8	1.20
2-甲基庚烷	766.0	766.2	766.3	766.3	0.10
4-甲基庚烷	767.5	767.6	767.8	768.0	0.17
3,4-二甲基己烷	768.4	769.3	770.2	771.2	0.93
3-甲基-3-乙基戊烷	768.4	769.3	770.2	771.2	0.93
3-甲基庚烷	773.3	773.5	773.9	774.1	0.28
正辛烷	800.0	800.0	800.0	800.0	—

表 13-2　C_5～C_9 烷烃保留指数（一）[5]

固定液：苯二甲酸二壬酯

化合物 \ I \ 柱温/℃	60	80	100	化合物 \ I \ 柱温/℃	60	80	100
2-甲基丁烷	474	474	475	2,3-二甲基戊烷	672	673	676
2-甲基己烷	656	666	667	2,4-二甲基戊烷	628	629	630
2-甲基庚烷	764	764	765	3-乙基戊烷	688	689	692
3-甲基己烷	676	677	678	2,5-二甲基己烷	726	728	728
3-甲基庚烷	772	773	774	2,2,4-三甲基戊烷	687	690	692
3-甲基辛烷	870	871	872	4-甲基庚烷	768	768	769
2,2-二甲基丁烷	534	535	537	2,2,5-三甲基己烷	772	774	775
2,3-二甲基丁烷	566	568	571				

表 13-3　C_5～C_9 烷烃保留指数（二）[6]

固定液：角鲨烷

化合物 \ I \ 柱温/℃	30	50	化合物 \ I \ 柱温/℃	30	50
2-甲基丁烷	474	474	2,5-二甲基己烷	728	729
正戊烷	500	500	2,4-二甲基己烷	731.5	732.5
2,3-二甲基丁烷	565	567.5	2,3,3-三甲基戊烷	734	737
2-甲基戊烷	569	569.5	3,3-二甲基己烷	741	743.5
3-甲基戊烷	582.5	584.5	2,3,4-三甲基戊烷	750.5	753
正己烷	600	600	2,3,3-三甲基戊烷	756	760
2,2-二甲基戊烷	624.5	626	2,3-二甲基己烷	759.5	760.5
2,4-二甲基戊烷	629	630	2-甲基庚烷	764.5	765
2,2,3-三甲基丁烷	636.5	639.5	4-甲基庚烷	767.5	767.5
2-甲基己烷	666	666.5	3,4-二甲基己烷	769	771
2,3-二甲基戊烷	669.5	671	3-甲基庚烷	773	773.5
3-甲基己烷	675	676	2,2,5-三甲基己烷	775	776.5
3-乙基戊烷	684.5	686	2,2,4-三甲基己烷	786.5	789
2,2,4-三甲基戊烷	688	690	正辛烷	800	800
正庚烷	700	700	2,3,5-三甲基己烷	810.5	812
2,2-二甲基己烷	718.5	719.5			

表 13-4　C_5～C_9 烷烃保留指数（三）[7]

固定液：角鲨烷

化合物 \ I \ 柱温/℃	30	50	70	化合物 \ I \ 柱温/℃	30	50	70
2,2-二甲基丙烷	410.6	411.7	412.9	2-甲基己烷	666.2	666.5	666.8
2-甲基丁烷	473.8	474.0	474.3	3-甲基己烷	675.5	676.2	676.9
正戊烷	500	500	500	3-乙基戊烷	684.7	685.9	687.1
2,2-二甲基丁烷	535.0	536.6	538.2	正庚烷	700	700	700
2,3-二甲基丁烷	565.6	567.6	569.7	2,2,4-三甲基戊烷	687.7	690.1	692.4
2-甲基戊烷	569.2	569.5	569.7	2,2,3,3-四甲基丁烷	720.7	725.9	731.1
3-甲基戊烷	583.0	584.0	585.0	2,2-二甲基己烷	718.4	719.5	720.7
正己烷	600	600	600	2,5-二甲基己烷	727.9	728.5	729.1
2,2-二甲基戊烷	621.5	625.9	627.2	2,4-二甲基己烷	731.1	732.1	733.2
2,4-二甲基戊烷	629.3	629.9	630.5	2,2,3-三甲基戊烷	734.0	737.3	740.6
2,2,3-三甲基丁烷	636.7	639.8	642.9	3,3-二甲基己烷	741.1	743.7	746.3
3,3-二甲基戊烷	656.0	658.9	661.8	2,3,4-三甲基戊烷	748.5	752.5	755.5
2,3-二甲基戊烷	669.6	671.7	673.7	2,3,3-三甲基戊烷	755.5	759.8	764.1

续表

化合物 \ 柱温/℃ (I)	30	50	70	化合物 \ 柱温/℃ (I)	30	50	70
2,3-二甲基己烷	759.0	760.4	761.8	2,5-二甲基庚烷	832.3	832.9	833.5
2-甲基-3-乙基戊烷	758.4	761.6	764.8	3,5-二甲基庚烷	832.6	833.7	834.8
2-甲基庚烷	764.6	765.1	765.7	2,4-二甲基庚烷	832.8	836.4	840.0
4-甲基庚烷	767.0	767.5	768.0	3,3-二甲基庚烷	833.8	836.1	838.4
3,4-二甲基己烷	768.7	770.9	773.2	2,3,3-三甲基己烷	836.3	840.0	843.7
3-甲基-3-乙基戊烷	770.4	774.4	778.4	2-甲基-3-乙基己烷	841.6	843.7	845.6
3-乙基己烷	772.1	772.9	773.6	2,3,4-三甲基己烷	846.6	849.6	852.6
3-甲基庚烷	772.1	772.9	773.6	2,2,3,3-四甲基戊烷	847.3	852.7	858.1
正辛烷	800	800	800	3-甲基-4-乙基己烷	851.7	854.8	857.9
2,2,4,4-四甲基戊烷	769.3	773.1	776.9	3,3,4-三甲基己烷	848.7	853.1	857.5
2,2,5-三甲基己烷	775.4	776.7	778.0	2,3-二甲基庚烷	853.5	854.8	856.1
2,2,4-三甲基己烷	786.8	789.5	792.2	3,4-二甲基庚烷	856.3	858.4	860.5
2,4,4-三甲基己烷	805.0	808.2	811.4	3-甲基-3-乙基己烷	850.0	853.5	857.0
2,3,5-三甲基己烷	810.7	812.4	814.1	4-乙基庚烷	856.6	857.5	858.4
2,2-二甲基庚烷	814.9	815.8	816.7	2,3,3,4-四甲基戊烷	853.6	858.9	864.2
2,4-二甲基庚烷	821.1	821.5	821.9	4-甲基辛烷	862.3	862.9	863.5
2,2,3,4-四甲基戊烷	815.6	820.1	824.6	3-乙基庚烷	866.0	866.9	867.8
2,2,3-三甲基己烷	818.7	821.9	825.1	2-甲基辛烷	864.4	864.7	865.0
2-甲基-4-乙基己烷	823.2	824.3	825.4	3-甲基辛烷	869.6	870.3	871.0
2,2-二甲基-3-乙基戊烷	818.0	822.2	826.4	2,3-二甲基-3-乙基戊烷	866.9	872.3	877.7
2,4-二甲基庚烷	825.3	827.6	829.9	3,3-二乙基戊烷	871.8	877.6	883.4
2,6-二甲基庚烷	826.7	827.2	827.7	正壬烷	900	900	900

表 13-5　C_5～C_9 烷烃保留指数（四）[402]

固定液：角鲨烷　　柱温：50℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
2,2-二甲基丙烷	412.3	2,2-二甲基己烷	719.4	2,2,4-三甲基己烷	789.1
2-甲基丁烷	475.3	2,5-二甲基己烷	728.4	2,4,4-三甲基己烷	807.7
2,2-二甲基丁烷	533.8	2,4-二甲基己烷	731.9	2,3,5-三甲基己烷	812.0
2,3-二甲基丁烷	567.3	2,2,3-三甲基戊烷	737.1	2,2-二甲基庚烷	815.4
3-甲基戊烷	581.2	2,3,4-三甲基戊烷	752.4	2,2,3,4-四甲基戊烷	819.6
2,2-二甲基戊烷	62[illegible].6	2,2,3-三甲基戊烷	759.4	2,2,3-三甲基己烷	812.6
2,4-二甲基戊烷	629.8	2,3-二甲基己烷	760.1	2,2-二甲基-3-乙基戊烷	822.2
2,2,3-三甲基丁烷	639.7	2-甲基-3-乙基戊烷	761.1	3,3-二甲基庚烷	835.8
3,3-二甲基戊烷	658.9	2-甲基庚烷	764.9	2,4-二甲基-3-乙基戊烷	836.5
2-甲基己烷	666.6	4-甲基庚烷	767.2	2,3,4-三甲基己烷	849.1
2,3-二甲基戊烷	671.7	3,4-二甲基己烷	770.6	2,2,3,3-四甲基戊烷	852.1
3-甲基己烷	676.2	3-甲基庚烷	772.3	2,3,3,4-四甲基戊烷	858.0
3-乙基戊烷	686.0	2,2,4,4-四甲基戊烷	772.7	3-甲基辛烷	870.2
2,2,4-三甲基戊烷	689.0	3-甲基-3-乙基戊烷	774.0	3,3-二乙基戊烷	877.2

表 13-6　C_5～C_9 烷烃保留指数（五）[78]

固定液：角鲨烷　　柱温：50℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
正戊烷	500.0	2-甲基戊烷	569.6	2,2-二甲基戊烷	625.8
2,2-二甲基丁烷	536.8	3-甲基戊烷	584.3	2,4-二甲基戊烷	629.8
2,3-二甲基丁烷	567.6	正己烷	600.0	2,2,3-三甲基丁烷	640.0

续表

化合物	I	化合物	I	化合物	I
3,3-二甲基戊烷	659.0	3-甲基庚烷	772.5	2,4-二甲基-3-乙基戊烷	836.4
2-甲基己烷	666.7	3-乙基己烷	772.7	2,3,3-三甲基己烷	840.0
2,3-二甲基戊烷	671.8	2,2,4,4-四甲基戊烷	773.1	2-甲基-3-乙基己烷	843.7
3-甲基己烷	676.3	3-甲基-3-乙基戊烷	774.4	2,3,4-三甲基己烷	849.1
3-乙基戊烷	686.2	2,2,5-三甲基己烷	776.7	2,2,3,3-四甲基戊烷	852.4
2,2,4-三甲基戊烷	690.2	2,2,4-三甲基己烷	789.5	3,3,4-三甲基己烷	853.1
正庚烷	700.0	正辛烷	800.0	3-甲基-3-乙基己烷	853.5
2,2-二甲基己烷	719.6	2,4,4-三甲基己烷	808.2	3-甲基-4-乙基己烷	854.8
2,2,3,3-四甲基丁烷	726.7	2,3,5-三甲基己烷	812.4	2,3-二甲基庚烷	854.8
2,5-二甲基己烷	728.5	2,2-二甲基庚烷	815.8	4-乙基庚烷	857.5
2,4-二甲基己烷	732.1	2,2,3,4-四甲基戊烷	820.1	3,4-二甲基庚烷	858.4
2,2,3-三甲基戊烷	737.3	2,4-二甲基庚烷	821.5	2,3,3,4-四甲基戊烷	858.9
3,3-二甲基己烷	743.8	2,2,3-三甲基己烷	821.8	4-甲基庚烷	863.0
2,3,4-三甲基戊烷	752.6	2,2-二甲基-3-乙基戊烷	822.2	2-甲基庚烷	864.7
2,3,3-三甲基戊烷	759.8	2-甲基-4-乙基己烷	824.3	3-乙基庚烷	866.9
2,3-二甲基己烷	760.4	2,6-二甲基庚烷	827.2	3-甲基辛烷	870.3
2-甲基-3-乙基戊烷	761.6	4,4-二甲基庚烷	827.6	2,3-二甲基-3-乙基戊烷	872.3
2-甲基庚烷	764.9	2,5-二甲基庚烷	832.9	3,3-二乙基戊烷	877.6
4-甲基庚烷	767.2	3,5-二甲基庚烷	833.7	正壬烷	900.0
3,4-二甲基己烷	770.9	3,3-二甲基庚烷	836.1		

表 13-7　C_5～C_{10}烷烃保留指数[15]

固定液	SE-30	角鲨烷	角鲨烷	正十六烷	三十六烷	苄基二苯	高真空硅烷脂	石蜡	正十六烷+fluolubrol
柱温/℃ / I / 化合物	80	80	25	25	78.5	78.5	95	78.5	25
2,2-二甲基丁烷	530	539	535	534	531	527	—	532	536
2,3-二甲基丁烷	562	569	566	563	569	566	—	571	565
2-甲基戊烷	568	570	570	568	569	568	571	569	573
3-甲基戊烷	583	585	584	581	585	585	586	586	583
2,2-二甲基戊烷	622	626	625	624	625	613	—	628	626
2,4-二甲基戊烷	628	630	630	629	628	616	—	633	631
2,2,3-三甲基丁烷	643	643	637	632	642	629	—	—	635
3,3-二甲基戊烷	660	662	656	653	662	662	—	664	654
2,3-二甲基戊烷	672	672	670	667	674	668	—	675	668
2-甲基己烷	667	667	667	666	666	658	670	667	667
3-甲基己烷	677	677	676	674	677	671	679	678	674
3-乙基戊烷	688	688	685	682	689	684	—	688	682
2,2,4-三甲基戊烷	692	694	687	687	691	674	—	691	690
2,2,3,3-四甲基丁烷	—	733	720	—	—	—	—	—	—
2,2-二甲基己烷	721	722	718	716	715	705	725	722	719
2,5-二甲基己烷	728	729	728	727	725	714	733	729	731
2,4-二甲基己烷	731	734	731	729	730	720	—	734	733
2,2,3-三甲基戊烷	739	742	734	730	740	733	—	741	733
3,3-二甲基己烷	746	747	740	739	745	737	—	747	743
2,3,4-三甲基戊烷	754	758	748	745	755	751	—	757	750
2,3,3-三甲基戊烷	762	765	755	—	765	760	—	763	755
2,3-二甲基己烷	761	761	758	—	760	757	—	761	761
2-甲基-3-乙基戊烷	763	761	759	—	763	762	—	773	760
2-甲基庚烷	764	765	764	—	762	758	767	764	770
4-甲基庚烷	769	768	767	—	766	762	—	769	771
3,4-二甲基己烷	773	774	768	—	773	773	—	774	770

续表

固定液	SE-30	角鲨烷	角鲨烷	正十六烷	二十六烷	苯基二苯	高真空硅烷脂	石蜡	正十六烷+fluolubrol
I 柱温/℃ 化合物	80	80	25	25	78.5	78.5	95	78.5	25
3-甲基-3-乙基戊烷	781	780	769	—	770	788	—	779	770
3-乙基己烷	776	775	771		772	773	—	782	774
3-甲基庚烷	775	773	770	—	771	768	776	—	775
2,2,4,4-四甲基戊烷	—	—	768	—	—	—	—	—	—
2,2,5-三甲基己烷	783	778	—	—	—	—	—	—	—
2,2,4-三甲基己烷	794	—	—	—	—	—	—		
2,3,5-三甲基己烷	818	—	810	—	—	—	—	—	—
2,2-二甲基庚烷	820		808	—	—	—	822	—	—
2,4-二甲基庚烷	823	822	—	—	—	—	—		
2,6-二甲基庚烷	828	827	—	—	—	—	831	—	—
2,5-二甲基庚烷	834	833	—	—	—	—	—	—	—
1,1,3-三甲基己烷	842	—	834	—	—		—	—	
2,3-二甲基庚烷	858	856	—	—	—	—	—	—	—
2-甲基辛烷	865	864	—	—	—	—	865	—	—
3-甲基辛烷	871	870	—	—	—	—	872	—	—
4-甲基辛烷	860	859	—	—	—	—	—		—
4-甲基壬烷	961	—	—	—	—		—		

表 13-8 $C_6 \sim C_8$ 烷烃保留指数（一）[59]

柱温：80℃

I 固定液 化合物	SE-30	OV-1	*I* 固定液 化合物	SE-30	OV-1
2,2-二甲基丁烷	538.6	538.7	3-乙基戊烷	—	687.6
2,3-二甲基丁烷	568.1	568.4	2,2,4-三甲基戊烷	693.3	
2-甲基戊烷	569.2	570.7	2,2-二甲基己烷	—	724.0
3-甲基戊烷	584.9	585.2	2,4-二甲基己烷	735.5	—
2,2-二甲基戊烷	626.4	626.6	2,2,3-三甲基戊烷	737.8	—
2,4-二甲基戊烷	631.7	632.0	2,3,4-三甲基戊烷	753.5	754.0
2,2,3-三甲基丁烷	—	639.2	2,3-二甲基己烷	—	762.6
3,3-二甲基戊烷	—	657.0	2-甲基庚烷	—	766.3
2,3-二甲基戊烷	—	669.9	3-甲基庚烷	774.6	774.4

表 13-9 $C_6 \sim C_8$ 烷烃保留指数（二）[58]

固定液	角鲨烷		正三十碳烷		固定液	角鲨烷		正三十碳烷	
I 柱温/℃ 化合物	70	80	70	80	*I* 柱温/℃ 化合物	70	80	70	80
2-甲基戊烷	570.3	570.5	599.0	570.3	3,3-二甲基戊烷	662.1	662.8	660.6	661.9
3-甲基戊烷	584.7	585.6	584.6	584.8	2,2,3-三甲基丁烷	643.2	644.6	640.7	642.0
2,2-二甲基丁烷	538.1	540.1	536.7	537.6	2-甲基庚烷	—	765.5	—	764.3
2,3-二甲基丁烷	569.2	569.6	568.2	568.2	3-甲基庚烷	—	772.6	—	772.4
2-甲基己烷	668.5	667.7	666.3	666.2	4-甲基庚烷	—	766.9	—	767.6
3-甲基己烷	676.8	677.0	676.3	676.9	3-乙基己烷	—	773.5	—	772.9
3-乙基戊烷	688.0	688.2	686.4	686.5	2,2-二甲基己烷	—	720.9		717.9
2,2-二甲基戊烷	627.4	627.9	624.8	626.2	2,3-二甲基己烷	—	762.0	—	761.3
2,3-二甲基戊烷	673.5	674.4	672.8	672.9	2,4-二甲基己烷	—	733.1		731.5
2,4-二甲基戊烷	631.5	631.3	628.7	628.8	2,5-二甲基己烷	—	729.7		727.7

续表

固定液	角鲨烷		正三十碳烷		固定液	角鲨烷		正三十碳烷	
柱温/℃ I 化合物	70	80	70	80	柱温/℃ I 化合物	70	80	70	80
3,3-二甲基己烷	—	746.2	—	745.7	2,3,4-三甲基戊烷	—	756.4	—	754.5
3,4-二甲基己烷	—	774.1	—	773.1	2,2,3,3-四甲基丁烷	—	773.0	—	731.0
2-甲基-3-乙基戊烷	—	764.2	—	763.1	苯	—	651.6	—	650.6
3-甲基-3-乙基戊烷	—	779.6	—	779.9	乙醇	—	354.2	—	347.0
2,2,3-三甲基戊烷	—	742.3	—	741.0	甲乙酮	—	557.0	—	542.6
2,2,4-三甲基戊烷	—	693.7	—	690.7	硝基甲烷	—	496.0	—	459.0
2,3,3-三甲基戊烷	—	765.3	—	765.0	吡啶	—	751.4	—	735.0

表 3-10 C_6～C_9 烷烃保留指数[136]

固定液：角鲨烷　　柱温：25℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
2,2-二甲基丁烷	534.8	2-甲基庚烷	764.6	3,3-二甲基庚烷	833.7
2,3-二甲基丁烷	565.0	3,4-二甲基己烷	768.0	2,3,4-三甲基己烷	842.6
2-甲基戊烷	569.4	4-甲基庚烷	766.5	3,3,4-三甲基己烷	847.8
3-甲基戊烷	583.0	2,2,4,4-四甲基戊烷	769.7	3-甲基-3-乙基己烷	849.4
2,2,3-三甲基丁烷	636.2	3-乙基己烷	771.3	2,3,3,4-四甲基戊烷	852.1
3,3-二甲基戊烷	655.6	3-甲基庚烷	771.5	3-甲基-4-乙基己烷	851.1
2-甲基己烷	666.2	2,2,5-三甲基己烷	774.8	2,3-二甲基庚烷	853.6
2,3-二甲基戊烷	669.9	2,2,4-三甲基己烷	785.8	3,4-二甲基庚烷	855.7
3-甲基己烷	675.2	2,3,5-三甲基己烷	810.2	4-乙基庚烷	856.4
3-乙基戊烷	684.7	2,2,3,4-四甲基戊烷	814.1	2,3-二甲基-3-乙基戊烷	865.7
2,2,4-三甲基戊烷	687.3	2,2-二甲基-3-乙基戊烷	817.1	4-甲基辛烷	862.3
2,2-二甲基己烷	718.3	2,2-二甲基庚烷	814.7	2-甲基辛烷	864.2
2,5-二甲基己烷	727.6	2,2,3-三甲基己烷	817.7	3,3-二乙基戊烷	870.9
2,2,3-三甲基戊烷	733.2	2,4-二甲基庚烷	821.0	4-乙基庚烷	866.0
2,4-二甲基己烷	730.8	4,4-二甲基庚烷	824.8	3-甲基辛烷	869.7
3,3-二甲基己烷	740.0	2-甲基-4-乙基己烷	823.4	正戊烷	500.0
2,3,4-三甲基戊烷	748.6	2,6-二甲基庚烷	826.6	正己烷	600.0
2,3,3-三甲基戊烷	753.9	2,4-二甲基-3-乙基戊烷	832.1	正庚烷	700.0
2-甲基-3-乙基戊烷	757.9	2,3,3-三甲基乙烷	835.2	正辛烷	800.0
2,3-二甲基己烷	758.5	3,5-二甲基庚烷	832.5	正壬烷	900.0
3-甲基-3-乙基戊烷	769.2				

表 3-11 C_8～C_{10} 烷烃保留指数[70]

固定液：角鲨烷　　柱温：100℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
2-甲基庚烷	765.2	3-乙基庚烷	869.5	5-甲基壬烷	957.9
3-甲基庚烷	773.4	3-甲基辛烷	871.9	3-乙基辛烷	965.0
4-甲基辛烷	863.7	4-乙基辛烷	952.2	3-甲基壬烷	970.5

表 13-12 C_9、C_{10}烷烃保留指数（一）[10]

柱温：60℃

固定液	角鲨烷		u_{con} LB 550x	
化合物 \ 保留指数	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
2,2,4,4-四甲基戊烷	774.6	1.4	769.1	2.1
2,2,5-三甲基己烷	777.3	0.0	770.4	0.8
2,2,4-三甲基己烷	790.7	1.1	784.6	1.6
2,4,4-三甲基己烷	809.7	1.5	804.8	2.5
2,3,5-三甲基己烷	813.2	0.8	809.8	1.3
2,2-二甲基庚烷	816.5	0.4	812.0	−0.5
2,4-二甲基庚烷	821.2	−0.2	816.6	0.7
2,2,3,4-四甲基戊烷	821.9	2.1	822.1	3.9
2,2,3-三甲基己烷	823.3	1.0	822.7	2.2
2-甲基-4-乙基己烷	824.9	0.4	823.1	3.0
2,2-二甲基-3-乙基戊烷	824.4	2.1	824.6	3.4
4,4-二甲基庚烷	828.6	0.8	824.8	1.7
2,6-二甲基庚烷	827.5	−0.3	822.6	0.5
α-3,5-二甲基庚烷	834.4	0.0	832.4	1.5
β-3,5-二甲基庚烷	834.4	0.0	832.4	1.5
2,5-二甲基庚烷	833.2	−0.2	830.1	0.3
2,4-二甲基庚烷	838.4	1.6	839.2	3.0
3,3-二甲基庚烷	837.3	0.7	836.9	1.8
2,3,3-三甲基己烷	841.7	1.4	842.1	3.1
2-甲基-3-乙基己烷	844.7	0.7	848.2	1.9
α-2,3,4-三甲基己烷	848.4	1.1	849.5	2.5
β-2,3,4-三甲基己烷	851.1	0.9	852.3	2.6
2,2,3,3-四甲基戊烷	855.8	1.6	858.4	3.9
3-甲基-4-乙基己烷	855.6	1.9	858.0	2.4
3,3,4-三甲基己烷	855.1	1.2	856.2	2.3
3-甲基-3-乙基己烷	856.0	1.2	856.2	1.8
α-3,4-二甲基庚烷	858.5	0.6	859.0	1.8
β-3,4-二甲基庚烷	859.3	0.2	859.6	1.5
2,3-二甲基庚烷	855.5	0.2	855.3	1.1
4-乙基庚烷	858.2	0.3	859.2	1.0
2,3,3,4-四甲基戊烷	861.1	2.0	865.1	3.6
4-甲基辛烷	863.3	−0.3	862.7	0.5
3-乙基庚烷	867.4	0.1	869.1	0.9
2-乙基庚烷	864.8	−0.3	862.7	0.0
3-甲基辛烷	870.8	0.0	870.7	0.6
2,3-二甲基-3-乙基戊烷	875.0	1.9	879.9	3.3
3,3-二乙基戊烷	880.2	2.7	884.6	3.2
壬烷	900.0	0.0	900.0	0.0
2,2,5,5-四甲基己烷	820.2	0.4	812.9	0.7
2,2-二甲基-4-乙基己烷	881.3	2.2	878.0	[illegible].5
2,4,6-三甲基庚烷	870.1	0.8	864.4	1.5
2,2,4,5-四甲基己烷	872.1	1.9	867.3	1.3
2,2,4-三甲基庚烷	875.7	2.2	870.0	1.0
2,2,3,5-四甲基己烷	873.3	2.1	870.7	1.3
2,2,6-三甲基庚烷	873.0	0.8	867.3	0.8
2,2,5-三甲基庚烷	878.1	1.3	874.6	0.4
2,4,4-三甲基庚烷	889.4	2.2	883.5	1.7
2,5,5-三甲基庚烷	891.7	1.4	890.5	1.8
2,3,3,5-四甲基己烷	903.3	2.3	901.5	2.5
2,2,4,4-四甲基己烷	888.6	3.2	886.1	2.7
2,5-二甲基-3-乙基己烷	891.4	2.1	890.9	1.5
2,2,4-三甲基-3-乙基戊烷	903.9	2.7	904.7	2.8
3,3,5-三甲基庚烷	907.7	2.0	905.2	1.7
2,4-二甲基辛烷	915.8	−0.1	910.3	0.2
2,3,5-三甲基庚烷	919	—	911	—
2,2-二甲基-3-乙基己烷	902.1	2.4	901.1	2.0
α-2,3,4,5-四甲基己烷	918.0	2.5	920.3	2.5
β-2,3,4,5-四甲基己烷	928.2	2.5	933.7	2.2
2-甲基-4-乙基庚烷	907.4	0.7	904.2	0.1
α-2,4,5-三甲基庚烷	906.0	1.5	904.7	0.9
β-2,4,5-三甲基庚烷	908.5	0.9	906.1	1.[illegible]
2,2-二甲基辛烷	914.9	0.8	911.1	0.1
2,4-二甲基-3-异丙基戊烷	915.1	2.7	915.2	2.3
4-正丙基庚烷	906	1.0	904.2	0.5
4,4-二甲基辛烷	918	1.0	917.5	2.0
2,2,3-三甲基庚烷	914.4	1.7	914.2	1.3
3-甲基-5-乙基庚烷	924	1.0	924.2	0.6
2,5-二甲基辛烷	921.8	0.3	919.3	0.6
2,6-二甲基辛烷	931.5	0.4	928.9	0.5
α-2,2,3,4-四甲基己烷	902.6	2.7	902.4	2.9
β-2,2,3,4-四甲基己烷	915.0	2.5	916.8	2.7
4-异丙基庚烷	925	0.3	925.0	0.5
2,2,3,4,4-五甲基戊烷	921.7	3.7	924.0	4.1
α-3,5-二甲基辛烷	921.1	0.5	917.5	0.3
β-3,5-二甲基辛烷	922.4	0.4	918.9	0.2
2-甲基-5-乙基庚烷	924	—	934.3	2.0
2,7-二甲基辛烷	928.5	0.4	923.5	−0.3
α-2,3,4-三甲基庚烷	933.1	1.5	932.8	0.9
β-2,3,4-三甲基庚烷	933.6	1.6	933.8	1.6
α-2,4-二甲基-3-乙基己烷	929.4	2.0	930.4	2.3
β-2,4-二甲基-3-乙基己烷	930.1	1.9	931.4	2.2
2,3,3-三甲基庚烷	931.7	2.0	932.4	2.1
2,2,3,3-四甲基己烷	928.8	2.7	932.7	2.7
α-2,3,5-三甲基庚烷	912.1	1.0	910.5	1.[illegible]
β-2,3,5-三甲基庚烷	912.7	1.0	910.6	1.1
α-3,6-二甲基辛烷	929	—	929.1	0.2
β-3,6-二甲基辛烷	929	—	929.1	0.2
4-甲基-4-乙基庚烷	937.6	1.8	941.6	1.9
2,3-二甲基-4-乙基己烷	930.6	1.5	930.0	1.7
2,4-二甲基-4-乙基己烷	920.7	2.6	919.4	2.5

续表

固定液	角鲨烷		u_{con} LB 550x		固定液	角鲨烷		u_{con} LB 550x	
保留指数 / 化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	保留指数 / 化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
3,4,4 三甲基庚烷	932.2	2.2	933.1	1.9	3-甲基-3-乙基庚烷	953	--	952.2	—
3,3-二甲基辛烷	932.0	1.4	931.8	0.9	3,4-二乙基己烷	945.8	1.8	948.5	1.7
2 甲基-3 乙基庚烷	941.0	0.1	941.1	0.1	2,3-二甲基辛烷	952.1	0.7	951.8	0.5
2,3,4,4-四甲基己烷	935.0	2.8	937.8	3.0	2,3,3,4-四甲基己烷	949.1	2.8	953.4	3.2
3,3,4-三甲基庚烷	936.6	2.4	938.9	2.7	5-甲基壬烷	957.4	0.1	957.4	0.0
3,4 二甲基 3-乙基己烷	964.6	2.5	969.5	3.2	4-甲基壬烷	960.0	0.1	959.3	0.0
α-4,5-二甲基辛烷	942.1	1.0	943.9	1.0	2,2,3,3,4-五甲基戊烷	953.4	4.0	959.3	4.5
β 4,5-二甲基辛烷	944.1	1.0	946.0	1.0	3,3-二乙基己烷	954.1	2.5	956.3	3.2
α-3-甲基-4-乙基庚烷	935.4	1.1	939.3	1.2	3-乙基辛烷	964.0	0.2	965.2	0.2
β-3-甲基-4-乙基庚烷	935.9	1.1	939.5	1.3	2-甲基-3-异丙基己烷	915.5	2.1	915.7	1.9
α-3,4,5-三甲基庚烷	944.8	1.2	947.0	1.4	2-甲基壬烷	963.9	0.1	961.7	0.1
β-3,4,5-三甲基庚烷	945.1	1.2	947.5	1.4	3 甲基壬烷	969.6	0.2	969.2	0.1
3,3-二甲基-4-乙基己烷	937.8	2.6	939.9	3.1	2,3,4-三甲基-3-乙基戊烷	969.4	3.5	975.6	4.1
4-甲基-3-乙基庚烷	940.5	0.8	941.4	0.9	2,2,3-三甲基-3-乙基戊烷	965.7	4.0	973.0	4.3
α-3,4-二甲基辛烷	935.6	0.7	932.9	0.7	2-甲基-3,3-二乙基戊烷	984.0	3.5	991.0	3.9
β-3,4 二甲基辛烷	936.4	0.7	935.1	0.7	3,3,4,4-四甲基己烷	983.7	3.0	988.5	3.7
4 乙基辛烷	951.5	0.0	952.4	0.0	癸烷	1000.0	0.0	1000.0	0.0
2,3-二甲基 3-乙基己烷	949.4	2.0	951.2	2.2					

表 13-13　C_9、C_{10}烷烃保留指数（二）[38]

固定液：真空油　　柱温：95℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
2,2,5-三甲基己烷	774.9	正壬烷	900	2,3,4,4-四甲基己烷	936.3
2,2,4-三甲基己烷	788.8	2,4,6-三甲基庚烷	869.8	3,3,4-三甲基庚烷	936.3
2,3,5-三甲基己烷	811.7	2,2,4,5-四甲基戊烷	873.1	3,4-二甲基-3-乙基己烷	965.2
2,2-二甲基庚烷	814.2	2,2,4-三甲基庚烷	875.3	α-4,5-二甲基辛烷	942.8
2,4-二甲基庚烷	822.1	2,2,5 三甲基庚烷	877.6	β-4,5-二甲基辛烷	942.8
2,2,3-三甲基己烷	824.2	2,4,4-三甲基庚烷	892.2	α-3,4,5-三甲基庚烷	945.2
2,6-二甲基庚烷	826.8	2,2,4,4-四甲基己烷	888.8	β-3,4,5-三甲基庚烷	945.2
2,5-二甲基庚烷	832.8	3,3,5-三甲基庚烷	907.7	α-3,4-二甲基辛烷	936.3
α-+β-3,5-二甲基庚烷	834.1	2,4-二甲基辛烷	915.5	β-3,4-二甲基辛烷	936.3
3,3-二甲基庚烷	836.5	2-甲基-4-乙基庚烷	907.7	4-乙基辛烷	950.9
2,3,3-三甲基己烷	840.7	4-丙基庚烷	907.7	3-甲基-3-乙基庚烷	952.6
3,3,4-三甲基己烷	854.4	2,6-二甲基辛烷	930.8	2,3-二甲基-3-乙基己烷	948.7
3-甲基-3-乙基己烷	855.5	α-2,2,3,4-四甲基己烷	902.8	2,3-二甲基辛烷	951.8
α-3,4-二甲基庚烷	857.6	4-异丙基庚烷	922.2	5-甲基壬烷	958.6
β-3,4-二甲基庚烷	859.8	2,7-二甲基辛烷	927.8	4-甲基壬烷	960.8
2,3-二甲基庚烷	854.8	α-2,3,4-三甲基庚烷	933.7	2,2,3,3,4-五甲基戊烷	953.1
4-乙基庚烷	857.6	β-2,3,4-三甲基庚烷	933.7	3,3-二甲基己烷	957.2
2,3,3,4-四甲基戊烷	860.9	2,3,3-三甲基庚烷	933.7	3-乙基辛烷	964.7
4-甲基辛烷	863.1	α-2,3,5-三甲基庚烷	912.3	2-甲基壬烷	964.7
3-乙基庚烷	867.1	β-2,3,5-三甲基庚烷	912.3	3-甲基壬烷	970.2
2-甲基辛烷	864.3	α-3,6-二甲基辛烷	927.8	2,2,3-三甲基-3-乙基戊烷	967.3
3-甲基辛烷	871.1	β-3,6-二甲基辛烷	927.8	正癸烷	1000
3,3-二乙基戊烷	885.8				

表 13-14 C_{11}～C_{20}烷烃保留指数[37]

柱温：200 ℃

固定液	Apiezon L		SE-30		LAC2-R-446	
保留指数 / 化合物	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$
2,6-二甲基壬烷	1018.5	+0.045	1026.0	+0.053	—	—
2,6-二甲基癸烷	1112.0	+0.070	1119.1	+0.058	—	
2,6-二甲基十一烷	1207.0	+0.041	1215.5	+0.049		—
2,6,10-三甲基十一烷	1260.4	+0.013	1274.8	+0.039	1231.2	−0.070
2,6,10-三甲基十二烷	1366.3	+0.030	1378.9	+0.050	1346.7	−0.049
2,6,10-三甲基十三烷	1448.8	+0.011	1462.8	+0.031	1422.8	−0.079
2,6,10-三甲基十四烷	1540.0	+0.013	1554.6	+0.044	1509.9	−0.103
2,6,10-三甲基十五烷	1632.7	0.0	1650.2	+0.052	1602.5	0.112
2,6,10,14-四甲基十五烷	1686.6	0.0	1709.4	+0.028	1645.9	−0.137
2,6,10,14-四甲基十六烷	1790.9	+0.014	1813.6	+0.052	1759.3	0.121
2-甲基十四烷	1461.0	—	1461.8	—	1451.9	—
3-甲基十四烷	1469.3	—	1469.2	—	1469.6	

表 13-15 C_{16}～C_{25}烷烃保留指数[37]

固定液	Apiezon L		SE-30		LAC2-R-446
柱温/℃ / I / 化合物	180	200	170	200	160
3,7,11-三甲基十三烷	1469.8	—	1480.4	—	1460.7
3,7,11-三甲基十四烷	1552.8	—	1565.8	—	1539.6
3,7,11-三甲基十五烷	1641.7	—	1657.6	—	1630.6
3,7,11-三甲基十六烷	1735.8	—	1751.5		1718.6
2,6,10-三甲基十六烷	1726.9	—	1743.7	—	1700.0
2,6,10,14-四甲基十七烷		1871.5	—	1893.3	1839.3
2,6,10,14-四甲基十八烷	—	1959.2		1984.1	1928.4
2,6,10,14-四甲基十九烷		2052.8	—	2076.5	2018.0
2,6,10,14,18-五甲基十九烷		2113.4	—	2141.0	
2,6,10,14,18-五甲基二十烷		2214.2	—	—	

表 13-16 C_{17}～C_{24}烷烃保留指数[16]

固定液	OV-1		Dexsil 300		SE-52		Apiezon L		Carbowax 20M
柱温/℃ / I / 化合物	180	190	180	190	180	190	180	190	150
2-甲基十六烷	1664.8	—	1660.6	—	1663.8	—	1660.6	—	1661.7
2-甲基十八烷	1864.4	—	1860.3	—	1863.2	—	1860.4	—	1861.7
2-甲基二十烷	2064.3	—	2060.3	—	2063.1	—	2060.5	—	2061.7
3-甲基十七烷	1772.2	—	1770.8	—	1771.2		1768.4	—	1769.2
3-甲基十九烷	1972.1	—	1971.1	—	1971.2	—	1968.3	—	1969.2
3-甲基二十一烷	2172.0	—	2172.2	—	2171.3	—	2168.5	—	2169.3
4-甲基十八烷	—	1858.9		1856.3		1857.9	—	1654.7	1857.0
4-甲基二十烷	—	2058.5	—	2056.6	—	2057.4	—	2054.6	2057.0
4-甲基二十二烷	—	2258.3	—	2256.2	—	2257.2		2254.3	2256.9
5-甲基十九烷	—	1952.2		1949.2	—	1951.6	—	1946.6	1948.7
5-甲基二十一烷	—	2151.8	—	2149.1		2151.1	—	2146.4	2148.5
5-甲基二十二烷	—	2351.6	—	2349.1	—	2350.0		2346.3	2348.7

表 13-17 C_{21}～C_{25}烷烃保留指数[87]

固定液：Dexsil 300 柱温：210℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
正二十一烷	2100	正二十三烷	2300	5-甲基二十四烷	2447.1
2-甲基二十一烷	2160.3	5-甲基二十三烷	2347.8	4-甲基二十四烷	2455.6
3-甲基二十一烷	2171.1	4-甲基二十三烷	2355.9	2-甲基二十四烷	2460.5
正二十二烷	2200	2-甲基二十三烷	2360.7	3-乙基二十三烷	2466.6
4-甲基二十二烷	2254.6	3-乙基二十二烷	2366.2	3-甲基二十四烷	2471.4
2-甲基二十二烷	2259.2	3-甲基二十三烷	2371.6	十九烷基环戊烷	2486.1
3-甲基二十二烷	2269.3	十八烷基环戊烷	2386.4	正二十五烷	2500
十七烷基环戊烷	2284.5	正二十四烷	2400		

表 13-18 C_{24}～C_{27}烷烃保留指数[87]

固定液：Dexsil 300 柱温：220℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
正二十四烷	2400	5-甲基二十五烷	2539.9	4-甲基二十六烷	2655.2
5-甲基二十四烷	2448.4	4-甲基二十五烷	2555.4	2-甲基二十六烷	2659.5
4-甲基二十四烷	2455.7	2-甲基二十五烷	2560.1	3-甲基二十五烷	2666.7
2-甲基二十四烷	2462.2	3-乙基二十四烷	2567.3	3-甲基二十六烷	2670.8
3-甲基二十三烷	2467.8	3-甲基二十五烷	2570.9	二十一烷基环戊烷	2690.6
3-甲基二十四烷	2471.8	二十烷基环戊烷	2590.2	正二十七烷	2700.0
十九烷基环戊烷	2488.9	正二十六烷	2600		
正二十五烷	2500	5-甲基二十六烷	2647.6		

表 13-19 长链异构烷烃保留指数[82]

固定液：SE-30

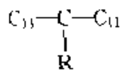
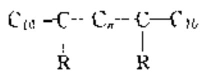
化合物	R	n	I（柱温 220℃）	I（柱温 270℃）
	甲基		2340	2340
	乙基		2405	2414
	丙基		2478	2480
	丁基		2560	2565
	戊基		2648	2630
	己基		2735	2745
	庚基		--	2839
	辛基		—	2930
	甲基	4		2670
	甲基	5		2774
	甲基	6		2867
	甲基	8		3068
	乙基	4		2809
	乙基	5		2903
	乙基	6		3008
	乙基	8		3205
	丁基	4		3090
	丁基	5		3186
	丁基	6		3298
	丁基	8		3485

表 13-20 烷基金刚烷保留指数（一）[17]

固定液	角鲨烷	季戊四醇四 β-氰乙基醚	固定液	角鲨烷	季戊四醇四-β-氰乙基醚
柱温/℃ / I / 化合物	125	125	柱温/℃ / I / 化合物	125	125
金刚烷	1105	1405	1,3,5,7-四甲基金刚烷	1177	1273
1-甲基金刚烷	1125	1377	1 乙基-3-甲基金刚烷	1264	1478
1,3-二甲基金刚烷	1145	1345	1-乙基-3,5-二甲基金刚烷	1276	1439
1,3,5-三甲基金刚烷	1162	1310			

表 13-21 烷基金刚烷保留指数（二）[34]

固定液	Apiezon L				角鲨烷				四-o-(2 氰乙基)五赤藓醇		
柱温/℃ / 保留指数 / 化合物	200	170	140	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	140	125	110	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	125	110	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
	I				I				I		
金刚烷	1216	1188	1162	9.0	1114	1104	1095	6.3	1405	1363	27.7
1-甲基金刚烷	1232	1205	1179	8.9	1135	1125	1116	6.2	1374	1339	23.6
1,3-二甲基金刚烷	1245	1218	1194	8.5	1154	1144	1136	6.1	1344	1312	21.0
1,3,5-三甲基金刚烷	1254	1230	1204	8.2	1170	1161	1153	5.7	1311	1282	18.9
1,3,5,7-四甲基金刚烷	1255	1234	1214	6.8	1185	1176	1169	5.3	1274	1251	14.9
2-甲基金刚烷	1300	1270	1242	9.7	1192	1182	1175	5.8	1475	1432	28.7
1-乙基金刚烷	1367	1337	1309	9.8	1259	1249	1240	6.4	1515	1471	29.0
1-乙基-3,5,7 三甲基金刚烷	1368	1348	—	6.7	1294	1285	—	5.8	1400	1375	16.8
1 乙基-3-甲基金刚烷	1371	1343	—	9.3	1273	1263	—	6.3	1478	1438	26.3
1 乙基-3,5-二甲基金刚烷	1372	1348	1321	8.5	1285	1276	1267	5.9	1439	1407	21.2
高金刚烷	1379	1345	1313	11.0	1255	1244	1234	7.0	1577	1527	33.4
2-乙基金刚烷	1384	1356	1329	9.2	1280	1270	1262	5.9	1549	1508	27.8
2-异丙基金刚烷	1449	1419	—	10.0	1342	1333	—	6.3	1600	1556	30.0
1 丙基金刚烷	1450	1422		9.5	1346	1335	1326	6.5	1584	1544	26.9
四环十二烷	1456	1420	1386	11.8	1322	1311	1300	7.4	1666	1616	33.2
2-丙基金刚烷	1463	1436	—	8.8	1363	1353	1346	5.8	1618	1575	28.4
1 异丙基金刚烷	1472	1441	—	10.3	1358	1347	1337	6.9	1623	1578	30.3
1,3-二乙基-5,7 二甲基金刚烷	1481	1456	—	8.3	—	1390	—	—	1520	—	—
1,3-二乙基金刚烷	1491	1461	—	9.9	1387	1377	—	6.7	1607	1568	26.6
1,3 二乙基-5-甲基金刚烷	1492	1463	—	9.6	—	1384	—	—	1565	—	—
2-异丁基金刚烷	1500	1473	—	9.0	—	—	—	—	—	—	—
1 丁基金刚烷	1542	1514	—	9.4	—	—	—	—	—	—	—
2-丁基金刚烷	1556	1529	—	8.9	—	—	—	—	—	—	—
1 叔丁基金刚烷	1559	1525	—	11.4	—	—	—	—	—	—	—
1-仲丁基金刚烷	1570	1538	—	10.6	—	—		—	—	—	—
2-(1-金刚基)-戊烷	1646	1616	—	10.2	—	—	—	—	—	—	—
3-(1-金刚基)-戊烷	1653	1620		10.9	—	—	—	—	—	—	—
二金刚烷	1676	1631		15.0	—	—	—		—	—	—
4-甲基二金刚烷	1691	1647	—	14.6	—	—	—	—	—		—
1-甲基二金刚烷	1731	1683	—	16.0	—	—	—	—	—	—	—
3-甲基二金刚烷	1750	1704	—	15.3	—	—	—	—	—	—	—

第二节　烯烃与炔烃的保留指数

表 13-22　C_2～C_{14}烯烃保留指数[58]

固定液：角鲨烷　　柱温：100℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
乙烯	178.30	反-3-壬烯	886.40	1-十二烯	1183.00
丙烯	288.20	顺-3-壬烯	887.50	顺-3-十二烯	1185.10
1-丁烯	385.20	反-2-壬烯	896.40	反-3-十二烯	1185.10
反-2-丁烯	405.90	顺-2-壬烯	901.90	反-2-十二烯	1196.90
顺-2-丁烯	417.80	顺-5-癸烯	981.60	顺-2-十二烯	1201.70
1-戊烯	482.60	反-4-癸烯	982.50	顺-6-十三烯	1271.20
反-2-戊烯	499.50	1-癸烯	982.50	顺-5-十三烯	1273.80
顺-2-戊烯	505.40	顺-4-癸烯	982.80	反-6-十三烯	1277.40
1-己烯	583.80	反-5-癸烯	984.10	顺-4-十三烯	1278.60
反-3-己烯	591.10	反-3-癸烯	985.80	反-5-十三烯	1279.50
顺-3-己烯	593.30	顺-3-癸烯	985.80	反-4-十三烯	1279.90
反-2-己烯	596.50	反-2-癸烯	996.70	1-十三烯	1283.10
顺-2-己烯	604.90	顺-2-癸烯	1001.70	顺-3-十三烯	1284.40
1-庚烯	683.10	顺-5-十一烯	1078.20	反-3-十三烯	1284.90
反-3-庚烯	687.40	顺-4-十一烯	1080.50	反-2-十三烯	1297.00
顺-3-庚烯	692.00	反-4-十一烯	1081.10	顺-2-十三烯	1301.60
反-2-庚烯	698.70	反-5-十一烯	1081.80	顺-7-十四烯	1366.70
顺-2-庚烯	704.70	1-十一烯	1082.40	顺-6-十四烯	1368.60
1-辛烯	782.60	顺-3-十一烯	1085.30	顺-5-十四烯	1372.00
反-4-辛烯	784.10	反-3-十一烯	1085.40	反-7-十四烯	1374.50
顺-4-辛烯	788.20	反-2-十一烯	1096.60	反-6-十四烯	1375.70
反-3-辛烯	788.20	顺-2-十一烯	1101.50	顺-4-十四烯	1377.70
顺-3-辛烯	789.80	顺-6-十二烯	1175.00	反-5-十四烯	1378.40
反-2-辛烯	797.50	顺-5-十二烯	1175.60	反-4-十四烯	1379.30
顺-2-辛烯	803.20	反-6-十二烯	1179.60	1-十四烯	1383.20
1-壬烯	882.50	顺-4-十二烯	1179.60	顺-3-十四烯	1384.10
反-4-壬烯	884.20	反-5-十二烯	1180.60	反-3-十四烯	1384.60
顺-4-壬烯	885.40	反-4-十二烯	1180.60	反-2-十四烯	1396.90

表 13-23　C_3～C_6烯烃保留指数[51]

固定液	角鲨烷	十八烯-1	Apiezon L	二甲砜	β，β-氧二丙腈
化合物 / 柱温/℃	80	25	130	25	60
1-丙烯	287	—	296	—	398
1-丁烯	384	387.0	394	448.8	498
顺-2-丁烯	417	419.3	428	493.2	559
反-2-丁烯	405	410.2	410	476.3	526
2-甲基-1-丙烯	383	386.4	389	456.7	511
1-戊烯	482	483.9	486	546.0	593
顺-2-戊烯	504	506.6	511	578.0	636
反-2-戊烯	499	503.2	504	568.9	611
2-甲基-1-丁烯	488	490.1	493	563.5	620
3-甲基-1-丁烯	451	—	455	505.8	545
2-甲基-2-丁烯	514	—	522	593.9	654
1-己烯	583	584.3	588	648.3	694

续表

固定液	角鲨烷	十八烯-1	Apiezon L	三甲砜	β,β-氧二丙腈
柱温/℃ / I / 化合物	80	25	130	25	60
顺-2-己烯	604	604.0	611	675.0	730
反-2-己烯	597	598.9	599	661.4	701
顺-3-己烯	593	593.6	597	659.2	709
反-3-己烯	592	593.8	591	653.7	688
2-甲基-1-戊烯	581	581.7	586	652.4	703
3-甲基-1-戊烯	554	—	561	—	644
4-甲基-1-戊烯	551	550.1	555	605.9	644
2-甲基-2-戊烯	598	599.2	601	672.4	718
顺 3 甲基 2 戊烯	—	603.3	—	681.5	—
反 3 甲基-2 戊烯	—	613.1	—	688.1	—
顺-4-甲基-2-戊烯	557	557.3	560	614.6	646
反-4-甲基-2-戊烯	562	563.4	561	618.0	656
2 乙基-1 丁烯	592	593.3	599	666.4	720
2,3 二甲基 1-丁烯	560	559.0	566	626.5	677
3,3-二甲基-1-丁烯	509	507.1	511	554.7	588
2,3-二甲基-2-丁烯	626	625.2	636	711.8	770
1-庚烯	683	683.8	688	747.1	791
顺-2-庚烯	—	704.0		764.0	
反-2-庚烯	698	700.0	702	754.0	802
顺-3-庚烯	—	690.4	—	754.0	—
反-3-庚烯	688	688.5	688	743.8	777
4-甲基-1-己烯	660	657.5	667	718.6	763
2,3-二甲基-1-戊烯	654	649.0	—	712.0	759
2,4-二甲基-1-戊烯	640	637.4	—	699.3	740
4,4-二甲基-1-戊烯	608	603.8	612	652.3	690
2,3-二甲基-2-戊烯	705	701.9	—	782.7	835
2,4-二甲基-2-戊烯	640	642.5	—	699.1	725
反-3,4-二甲基-2-戊烯	679	676.8	—	744.2	—
顺-4,4-二甲基-2-戊烯	639	633.4	647	691.6	—
反-4,4-二甲基-2-戊烯	615	615.0	610	662.0	—
2,3,3-三甲基-1-丁烯	632	625.8	641	691.4	—
1 辛烯	782	—	788		886
顺-2 辛烯	802	—	810	—	922
反-2-辛烯	797	—	801	—	898
2,4,4-三甲基-1-戊烯	708	—	—	—	—
2,4,4 三甲基-2-戊烯	717	—	—	—	—
2,3,4-三甲基-2-戊烯	767	—	—	—	—

表 13-24 C_4～C_9 烯烃保留指数[97]

柱温：40℃

固定液	J&W DB-1		H-P PONA		J&W DB-5	
保留指数 / 化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
2-甲基丙烯	—	—	389.8	−0.17	—	—
1-丁烯	—	—	390.8	−0.17	—	—
反 2 丁烯	409.9	−0.26	409.9	−0.28	—	—
顺-2-丁烯	424.6	−0.10	424.6	−0.14	—	—

续表

固定液	J&W DB-1		H-P PONA		J&W DB-5	
化合物 \ 保留指数	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
3-甲基-1-丁烯	457.2	0.09	457.2	0.05	—	—
1-戊烯	488.7	−0.08	488.8	−0.05	491.7	−0.06
2-甲基-1-丁烯	495.2	−0.18	495.3	−0.19	—	—
反-2-戊烯	506.9	−0.39	507.1	−0.34	510.0	−0.35
3,3-二甲基-1-丁烯	514.1	0.31	514.3	0.36	515.4	0.27
顺-2-戊烯	515.1	−0.15	515.2	−0.10	518.4	−0.14
2-甲基-2-丁烯	520.0	−0.04	520.1	−0.05	523.0	−0.04
环戊烯	553.8	1.24	554.0	1.31	561.3	1.37
4-甲基-1-戊烯	556.5	0.27	556.5	0.25	558.7	0.19
3-甲基-1-戊烯	558.2	0.56	558.2	0.55	560.3	0.54
2,3-二甲基-1-丁烯	566.3	0.29	566.3	0.31	568.9	0.22
4-甲基-顺-2-戊烯	567.4	−0.08	567.5	−0.04	569.2	−0.09
4-甲基-反-2-戊烯	570.1	−0.25	570.1	−0.29	572.3	−0.29
2-甲基-1-戊烯	588.0	0.06	588.0	0.06	591.0	0.04
1-己烯	588.8	0.01	589.0	0.03	592.1	0.03
2-乙基-1-丁烯	598.9	−0.11	599.1	−0.05	602.7	−0.04
反-3-己烯	601.7	−0.37	601.7	−0.42	604.8	−0.34
顺-3-己烯	603.0	−0.05	603.1	−0.03	606.0	−0.06
反-2-己烯	604.4	−0.26	604.5	−0.26	607.4	−0.23
2-甲基-2-戊烯	606.8	−0.26	606.8	−0.25	609.7	−0.22
3-甲基环戊烯	609.7	1.27	609.9	1.27	615.8	1.30
3-甲基-顺-2-戊烯	610.2	0.24	610.3	0.25	613.3	0.26
4,4-二甲基-1-戊烯	610.8	0.69	610.8	0.68	612.3	0.68
顺-2-己烯	613.9	0.05	613.9	0.05	617.2	0.05
3-甲基-反-2-戊烯	619.9	0.00	620.0	0.00	623.5	0.04
4,4-二甲基-反-2-戊烯	625.2	−0.26	625.3	−0.28	626.7	−0.32
2,3-二甲基-2-丁烯	630.6	0.27	630.7	0.28	634.0	0.36
3,3-二甲基-1-戊烯	631.1	0.97	631.1	0.98	633.0	0.93
2,3,3-三甲基-1-丁烯	634.3	0.95	634.4	0.96	636.8	0.92
3,4-二甲基-1-戊烯	642.2	0.93	642.3	0.94	644.5	0.90
4,4-二甲基-顺-2-戊烯	642.9	0.87	642.9	0.85	645.1	0.85
2,4-二甲基-1-戊烯	646.4	0.40	646.4	0.39	648.4	0.35
1-甲基环戊烯	648.9	1.18	649.1	1.20	655.5	1.29
3-甲基-1-己烯	650.8	0.51	650.8	0.48	652.8	0.47
2-甲基-顺-3-己烯	652.1	0.00	652.1	0.00	653.6	−0.04
3-乙基-1-戊烯	654.3	0.78	654.3	0.78	656.2	0.80
2,4-二甲基-2-戊烯	654.5	−0.51	654.5	−0.50	656.2	−0.52
5-甲基-1-己烯	656.6	0.21	656.7	0.18	659.3	0.13
2,3-二甲基-1-戊烯	658.3	0.76	658.4	0.76	660.8	0.73
2-甲基-反-3-己烯	660.2	−0.41	660.2	−0.42	662.3	−0.44
4-甲基-1-己烯	663.8	0.48	663.8	0.45	666.6	0.43
4-甲基-反-2-己烯	666.0	0.21	666.0	0.17	668.1	0.22
4-甲基-顺-2-己烯	666.0	0.35	666.1	0.42	668.0	0.40
2-乙基-3-甲基-1-丁烯	666.3	0.25	666.4	0.27	669.3	0.20
5-甲基-反-2-己烯	667.9	−0.11	667.9	−0.07	670.1	−0.09
环己烯	674.2	2.11	674.5	2.15	683.6	2.22
3,4-二甲基-顺-2-戊烯	679.2	0.38	679.4	0.38	681.7	0.39

续表

固定液 \ 保留指数 \ 化合物	J&W DB-1		H-P PONA		J&W DB-5	
	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
5-甲基-顺-2-己烯	679.5	0.37	679.5	0.36	682.2	0.32
2-甲基-1-己烯	685.9	0.04	685.9	0.09	689.1	0.01
3,4-二甲基-反-2-戊烯	687.7	0.19	687.8	0.16	690.7	0.20
1-庚烯	688.6	0.00	688.6	0.00	691.9	0.03
2-乙基-1-戊烯	689.3	0.11	689.4	0.12	692.6	0.08
3-甲基-顺-3-己烯	694.6	0.09	694.7	0.12	697.6	0.13
反-3-庚烯	698.0	0.25	698.0	−0.25	701.0	−0.25
顺-3-庚烯	700.9	0.03	701.2	0.10	703.9	0.00
3-甲基-顺-2-己烯	701.6	0.34	701.7	0.34	704.5	0.38
2-甲基-2-己烯	701.9	−0.21	702.1	−0.17	704.6	−0.20
3-甲基-反-3-己烯	702.9	−0.23	703.0	−0.21	706.1	−0.19
反-2-庚烯	704.6	−0.20	704.7	−0.21	707.8	−0.16
3-乙基-2-戊烯	706.2	0.23	706.4	0.25	709.7	0.29
3-甲基-反-2-己烯	709.2	0.15	709.3	0.14	712.4	0.19
顺-2-庚烯	712.6	0.11	712.7	0.12	716.2	0.10
2,3-二甲基-2-戊烯	713.2	0.40	713.3	0.45	716.6	0.47
3-乙基环戊烯	716.4	1.60	716.6	1.63	722.9	1.68
3-甲基环己烯	732.5	2.19	732.7	2.26	740.6	2.28
4-甲基环己烯	733.2	2.30	733.4	2.35	741.3	2.36
3,4-二甲基-1-己烯①	745.0	1.02	744.9	1.03	747.6	0.96
3,4-二甲基-1-己烯①	746.0	0.94	746.1	0.98	748.7	0.92
2,3-二甲基-1-己烯	747.3	0.70	747.4	0.70	749.5	0.68
1-乙基环戊烯	750.7	1.18	750.9	1.23	757.7	1.31
2,5-二甲基-2-己烯	762.1	0.16	762.2	0.12	764.1	0.13
1-甲基环己烯	762.6	2.06	762.7	2.13	771.0	2.17
2-甲基-1-庚烯	784.1	0.05	784.3	0.06	787.4	0.01
1-辛烯	788.2	0.01	788.3	0.04	791.5	0.00
反-4-辛烯	794.5	−0.05	794.6	−0.09	797.3	−0.08
反-3-辛烯	797.3	−0.20	797.4	−0.23	—	—
顺-4-辛烯	797.9	0.24	797.9	0.23	801.0	0.28
顺-3-辛烯	798.4	0.14	798.6	0.14	801.5	0.21
2-甲基-2-庚烯	800.0	−0.05	800.1	−0.12	802.8	−0.02
反-2-辛烯	803.7	−0.18	803.7	−0.20	807.2	−0.22
顺-2-辛烯	811.4	0.16	811.4	0.15	815.0	0.20
1-壬烯	888.3	0.06	888.3	0.05	891.6	0.05

①立体异构体。

表 13-25 C_4～C_{14}烯烃保留指数[104]

固定液：OV-1　　柱温：100 ℃

化合物	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	化合物	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$
1-丁烯	388.7	—	1-壬烯	888.7	0.0100
1-戊烯	488.8	−0.0045	1-癸烯	988.6	0.0155
1-己烯	588.9	0.001	1-十一烯	1088.0	0.0225
1-庚烯	689.0	0.0095	1-十二烯	1187.9	0.0081
1-辛烯	789.0	0.0150	1-十四烯	1387.9	0.0250

表 13-26 $C_5 \sim C_8$ 烯烃保留指数 (一)[40]

固定液：角鲨烷　　柱温：50℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
2-甲基-2-丁烯	514.3	3-甲基-1-己烯	644.7	反-2-庚烯	698.4
3-甲基-1-戊烯	551.4	2-甲基-反-3-己烯	647.1	2,4,4-三甲基-1-戊烯	704.3
4-甲基-顺-2-戊烯	556.2	4-甲基-顺-2-己烯	654.9	2,4,4-三甲基-2-戊烯	715.4
1-己烯	582.3	4-甲基-反-2-己烯	656.7	2 甲基-3-乙基-1-戊烯	735.0
2-乙基-1-丁烯	592.0	4-甲基-1-己烯	657.9	2-甲基-反-3-庚烯	741.1
反-2 己烯	596.9	5-甲基-反-2-己烯	659.5	2,5-二甲基-2-己烯	749.9
2 甲基-2-戊烯	597.8	2-甲基-1-己烯	678.1	2,3,4-三甲基-2-戊烯	765.9
1,5-己二烯	562.9	反-3-庚烯	687.5	2-甲基-3-乙基-2-戊烯	778.4
3-甲基-顺-2-戊烯	602.8	2-甲基-2-己烯	691.2	1-辛烯	781.2
顺-2-己烯	603.6	3-甲基-反-3-己烯	691.2	反-4-辛烯	783.6
4,4-二甲基-1-戊烯	604.6	顺-3-庚烯	690.4	反-2-辛烯	797.7
4,4-二甲基-反 2-戊烯	614.7	3-甲基-顺-2-己烯	693.3	2,3-二甲基-1-己烯	739.3
3,3-二甲基-1-戊烯	626.2	2,2 二甲基-反-3-己烯	692.8		
4,4-二甲基-顺 2 戊烯	635.5	2,5-二甲基-反-3-己烯	695.1		

表 13-27 $C_5 \sim C_8$ 烯烃保留指数 (二)[1]

固定液	OV-101			角鲨烷		
柱温/℃ 保留指数 化合物	50	70	$\frac{\partial I}{\partial T}$	50	70	$\frac{\partial I}{\partial T}$
	I			I		
反-2-戊烯	507.0	506.8	−0.10	500.2	500.0	−0.10
顺-2-戊烯	512.0	512.4	0.20	505.0	505.2	0.10
2-甲基-2-丁烯	519.9	520.3	0.20	514.5	514.7	0.10
4-甲基-1-戊烯	556.0	556.8	0.40	549.7	550.8	0.55
顺-4-甲基-2-戊烯	565.6	566.1	0.25	556.2	556.6	0.20
2,3-二甲基-1-丁烯	565.8	566.3	0.25	558.8	559.6	0.40
反-4-甲基-2-戊烯	569.1	568.8	−0.15	562.1	551.9	−0.10
2 甲基-1-戊烯	587.5	588.1	0.30	580.3	580.9	0.30
1-己烯	589.4	590.0	0.30	582.5	583.0	0.25
顺-3-己烯	602.4	602.7	0.15	592.8	593.1	0.15
反-3-己烯	602.8	602.4	−0.20	592.5	591.9	−0.30
2-甲基-2-戊烯	606.2	606.0	−0.10	598.1	597.9	−0.10
顺-2-己烯	613.6	614.3	0.35	604.0	604.6	0.30
4,4-二甲基-1-戊烯	614.5	615.9	0.70	604.9	606.6	0.85
反-3-甲基-2-戊烯	620.6	620.9	0.15	613.1	613.3	0.10
反-4,4-二甲基-2-戊烯	621.3	621.2	−0.05	614.7	614.7	0.00
2,3-二甲基-2-丁烯	630.6	631.1	0.25	625.3	626.0	0.35
3,3-二甲基-1-戊烯	631.6	633.8	1.10	626.4	628.8	1.20
2,3,3-三甲基-1-丁烯	639.1	641.4	1.15	628.6	630.9	1.15
3,4-二甲基-1-戊烯	644.2	646.4	1.10	637.2	639.5	1.15
顺-4,4-二甲基-2-戊烯	645.1	646.9	0.90	635.8	637.8	1.00
2,4 二甲基-1-戊烯	645.3	646.5	0.60	637.9	639.2	0.65
2,4-二甲基-2-戊烯	649.1	648.4	−0.35	640.7	640.3	−0.20
3-甲基-1-己烯	653.4	654.7	0.65	644.8	646.2	0.70
2,3-二甲基-1-戊烯	656.9	658.5	0.80	650.6	652.2	0.80
顺 4-甲基-2-己烯	660.0	661.2	0.60	655.1	656.1	0.50
反-4-甲基-2-己烯	665.0	665.6	0.30	657.0	657.6	0.30

续表

固定液	OV-101			角鲨烷		
保留指数 / 柱温/℃ / 化合物	50	70	$\frac{\partial I}{\partial T}$	50	70	$\frac{\partial I}{\partial T}$
	I			I		
顺3,4 二甲基 2-戊烯	676.7	677.7	0.50	670.9	671.7	0.40
2 甲基 1-己烯	685.1	685.8	0.35	676.0	676.7	0.35
反-3,4-二甲基 2 戊烯	685.1	685.8	0.35	678.0	678.7	0.35
1-庚烯	688.1	688.9	0.40	682.0	682.6	0.30
顺-3-甲基-3-己烯	691.0	691.3	0.15	684.8	685.1	0.15
反-3-庚烯	694.0	694.2	0.10	687.5	687.5	0.00
顺-3-庚烯	696.1	696.9	0.40	690.5	691.1	0.30
2 甲基-2 己烯	698.3	698.3	0.00	691.4	691.4	0.00
顺-3-甲基-2-己烯	701.0	701.7	0.35	693.8	694.4	0.30
反 2,5-二甲基-2-己烯	703.7	703.2	−0.25	695.0	694.5	−0.25
反 2-庚烯	709.0	709.2	0.10	698.6	698.7	0.05
2,3-二甲基-2-戊烯	711.0	712.2	0.60	703.3	704.4	0.55
顺-2,2-二甲基-3-己烯	723.2	724.7	0.75	717.0	718.7	0.85
2,3-二甲基-1-己烯	748.8	750.0	0.60	739.1	740.6	0.75
反 2-甲基-3-庚烯	750.7	751.1	0.20	741.1	741.4	0.15
2,5 二甲基-2-己烯	759.0	760.0	0.50	749.8	750.5	0.35
2,3,4 三甲基-2-戊烯	773.5	774.8	0.65	756.7	767.0	0.65
1 辛烯	788.3	789.0	0.35	781.0	781.8	0.40
反 4 辛烯	792.8	793.1	0.15	783.9	784.1	0.10
2,3-二甲基-2-己烯	795.2	796.2	0.50	789.0	790.0	0.50

表 13-28 C_5～C_9 烯烃保留指数（三）[136]

固定液：角鲨烷　　柱温：25℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
反-2-戊烯	501.0	4,4 二甲基 1 戊烯	602.7	2-乙基-1-戊烯	681.7
反-4-甲基-2-戊烯	561.9	2 甲基-2 戊烯	598.0	2-甲基-2-己烯	692.0
反-3-己烯	593.4	3,3-二甲基-1-戊烯	623.5	3-乙基-2-戊烯	695.9
反 3-甲基 2-戊烯	612.6	2,3,3-三甲基-1-丁烯	625.6	2,3-二甲基-2-戊烯	701.9
反 2 甲基-3-戊烯	648.0	2,3-二甲基-2-丁烯	624.4	2,4,4-三甲基-2-戊烯	713.9
反-4-甲基-2-己烯	655.5	3,4-二甲基-1-戊烯	634.6	1-辛烯	780.3
3,3-二甲基-1-丁烯	505.2	3 甲基-1-己烯	643.5	1-壬烯	881.2
4-甲基-1-戊烯	548.0	3 乙基-1-戊烯	645.0	反-3-庚烯	687.0
3-甲基-1-戊烯	549.4	2,3-二甲基-1-戊烯	648.1	反-2-庚烯	698.7
2,3-二甲基-1-丁烯	557.4	5-甲基-1-己烯	648.8	反-4-辛烯	783.0
2-甲基-1-戊烯	579.6	4-甲基-1-己烯	656.5	反-3-辛烯	789.0
1-己烯	581.6	2 甲基-1-己烯	677.5	反-2-辛烯	798.6
2 乙基-1 戊烯	592.0	1-庚烯	681.3		

表 13-29 C_5～C_9 烯烃保留指数[6]

固定液：角鲨烷

I / 柱温/℃ / 化合物	30	50	I / 柱温/℃ / 化合物	30	50
2-甲基-2 丁烯	515	515	2-甲基-反-3-己烯	647	647
3 甲基-顺-2-戊烯	612.5	613	2,3-二甲基-1-戊烯	648	650
4,4-二甲基-反 2-戊烯	614.5	615	4-甲基-1-己烯	655.5	656.5
2,4-二甲基-1-戊烯	636	637.5	4-甲基-反-2-己烯	658	659
2,4-二甲基-2-戊烯	641	641	3,4-二甲基-反-2-戊烯	677	677.5

续表

I \ 柱温/℃ 化合物	30	50	I \ 柱温/℃ 化合物	30	50
3-甲基-反-3-己烯	684	684	2,3-二甲基-2-己烯	740	741
2-甲基-2-己烯	690.5	691	2,5-二甲基-1-己烯	740	741
2,2-二甲基-反-3-己烯	693	693	3,4,4-三甲基-顺-反-2-戊烯	745.5	746.5
3-甲基-顺-3-己烯	695	695	2-异丙基-1-戊烯	748.5	750
3,4,4-三甲基-1-戊烯	698.5	700	2,5-二甲基-2-己烯	749.5	750
2,3-二甲基-2-戊烯	702	704	3,5-二甲基-顺-反-2-己烯	751.5	752
2,4,4-三甲基-1-戊烯	702	704	2,3-二甲基-顺-反-3-己烯	754.5	756
5,5-二甲基-反-2-己烯	706	707	3,4-二甲基-1-己烯	755.5	756
3-甲基-2-异丙基-1-丁烯	708.5	710.5	3,4-二甲基-顺-反-2-己烯	759	760.5
2,4,4-三甲基-2-戊烯	714.5	715	2,3,4-三甲基-2-戊烯	765.5	766
5,5-二甲基-顺-2-己烯	721.5	723.5	2-甲基-x-庚烯	772	772
2,3,4-三甲基-1-戊烯	724.5	726.5	3,4-二甲基-x-己烯	782.5	782.5
2,4-二甲基-顺-反-3-己烯	730	730	2,3-二甲基-2-己烯	787.5	788.5
2,3,3-三甲基-1-戊烯	730.5	734	2-甲基-2-庚烯	789.5	789.5
4,5-二甲基-1-己烯	734	735	2,5,5-三甲基-x-己烯	794.5	795.5
2,4-二甲基-1-己烯	737.5	738.5	3-甲基-顺-反-2-庚烯	797	797.5

表 13-30 C_6 烯烃保留指数[124]

固定液：链合二甲基硅烷　　柱温：50℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
4-甲基-1-戊烯	555.6	2-甲基-1-戊烯	587.3	2-甲基-2-戊烯	606.8
顺-4-甲基-2-戊烯	565.4	反-3-己烯	600.4	顺-2-己烯	610.9
2,3-二甲基-1-丁烯	565.4	顺-3-己烯	600.4	2,3-二甲基-2-丁烯	631.6
反-4-甲基-2-戊烯	567.9	反-2-己烯	604.9		

表 13-31 C_6～C_{12}烯烃保留指数（一）[20]

固定液	角鲨烷					Apiezon L		
I \ 柱温/℃ 化合物	50	60	80	100	86	100	120	$\frac{\partial I}{\partial T}$
1-己烯	582.3	—	—	-	583.1	589.6	—	—
顺-2-己烯	603.6	—	—	—	604.6	616.1		—
反-2-己烯	596.8	—	—	—	596.7	606.5	—	—
顺-3-己烯	592.7	--	—	—	593.0	595.8	—	
反-3-己烯	592.7	—		--	591.4	595.8	—	—
1-庚烯	—	682.1		--	682.8	689.4	—	—
顺-2-庚烯	—	703.5	—	—	704.3	713.2	--	—
反-2-庚烯	--	698.2	—	—	698.7	704.9	—	
顺-3-庚烯	—	690.9	—	—	691.7	697.4	—	
反-3-庚烯	-	687.5	·	—	687.5	691.3	—	—
1-辛烯	—	—	781.4	—	782.3	789.2	--	·
顺-2-辛烯	—	—	802.4	—	802.8	811.4	-	--
反-2-辛烯	—	—	797.2	—	797.7	803.6	—	—
顺-3-辛烯	—	—	788.7	—	789.5	796.0	—	—
反-3-辛烯	—	—	788.5	—	788.4	791.5	—	—
顺-4-辛烯	—	—	787.9	—	787.9	794.3	--	·
反-4-辛烯	—	—	783.4	—	784.2	786.9	—	--

续表

固定液	角鲨烷					Apiezon L		
化合物 \ I \ 柱温/℃	50	60	80	100	86	100	120	$\frac{\partial I}{\partial T}$
1-壬烯	—	—	—	882.7	882.2	889.5	890.3	0.04
顺-2 壬烯	—	—	—	901.9	901.5	910.0	911.2	0.06
反-2 壬烯	—	—	—	896.5	896.6	902.6	902.5	0.005
顺 3-壬烯	—	—	—	887.5	887.0	893.1	894.4	0.07
反 3-壬烯	—	—	—	886.3	886.6	889.6	889.6	0
顺-4-壬烯	—	—	—	885.1	884.8	890.7	892.4	0.08
反-4-壬烯	—	—	—	884.1	884.2	887.2	887.8	0.03
1-癸烯	—	—	—		982.2	989.2	990.1	0.05
顺-2 癸烯		—	—	—	1001.2	1009.7	1011.3	0.08
反 2 癸烯		—	—	—	996.7	1002.9	1003.1	0.01
顺-3-癸烯	—	—	—		985.4	991.1	992.8	0.09
反 3-癸烯	—	—	—	—	985.4	988.6	989.1	0.03
顺 4-癸烯	—	—	—	—	982.2	987.5	988.7	0.06
反-4-癸烯	—	—	—	—	982.2	985.0	985.7	0.04
顺-5-癸烯	—	—	—	—	981.0	991.6	992.4	0.04
反-5-癸烯	—	—	—	—	984.0	988.0	988.3	0.02
1-十一烯	—	—	—	—	—	—	1089.9	—
顺-2-十一烯	—	—	—	—	—	—	1110.8	—
反 2 十一烯	—	—	—	—	—	—	1102.9	—
顺-3-十一烯	—	—	—	—	—	—	1091.9	—
反 3 十一烯	—	—	—	—	—	—	1088.8	—
顺 4-十一烯		—		—	—	—	1086.9	—
反-4 十一烯	—	—	—	—	—	—	1084.9	—
顺-5-十一烯	—	—	—	—	—	—	1084.8	—
反-5 十一烯	—	—	—	—	—	—	1085.2	—
1-十二烯	—	—	—	—	—	—	1190.1	—
顺-2-十二烯	—	—	—	—	—	—	1210.5	—
反-2-十二烯	—	—		—	—	—	1202.9	—
顺-3 十二烯	—	—	—	—	—	—	1191.3	—
顺-4-十二烯	—	—	—	—	—	—	1185.7	—
反-4 十二烯	—	—	—	—	—	—	1184.2	—
顺-5-十二烯	—	—	—	—	—	—	1184.2	—
反-5-十二烯	—	—	—	—	—	—	1182.2	—
顺-6-十二烯	—	—	—	—	—	—	1183.0	—
反 6-十二烯	—	—	—	—	—	—	1181.1	—

表 13-32 C_6～C_{12}烯烃保留指数（二）[20]

固定液：PEG-4000

化合物 \ 保留指数 \ 柱温/℃	50	60	70	80	100	120	$\frac{\partial I}{\partial T}$
	I						
1-己烯	648.5	648.7	—	—	—		0.02
顺-2-己烯	679.8	680.5	—	—	—	—	0.07
反-2-己烯	663.4	663.4	—	—	—	—	0
顺-3-己烯	660.1	660.1	—	—	—	—	0

续表

柱温/℃	50	60	70	80	100	120	$\frac{\partial I}{\partial T}$
保留指数 / 化合物	*I*						
反-3-己烯	656.4	655.6	—	—	—	—	−0.08
1-庚烯	747.7	747.3	—	749.0	—	—	0.03
顺-2-庚烯	778.9	778.7	—	783.8	—	—	0.12
反-2-庚烯	763.8	764.5		766.9	—	—	0.10
顺-3-庚烯	756.2	756.7	—	760.3	—	—	0.12
反-3-庚烯	747.7	746.4	—	749.0	—	—	0.04
1-辛烯	—	847.4	847.2	849.9	848.5	—	0.06
顺-2-辛烯	—	877.5	877.5	881.5	882.1	—	0.14
反-2-辛烯	—	864.3	864.0	866.5	865.7	—	0.07
顺-3-辛烯	—	853.9	854.0	858.1	859.4	—	0.16
反-3-辛烯	—	847.3	847.2	849.9	851.3	—	0.10
顺-4-辛烯	—	851.9	852.7	—	856.6	—	0.09
反-4-辛烯	—	839.3	839.0	841.9	840.1	—	0.06
1-壬烯		—	949.7	950.5	949.8	—	0.12
顺-2-壬烯	—	—	976.7	979.7	980.0	—	0.16
反-2-壬烯	—		963.2	964.8	964.7	—	0.08
顺-3-壬烯	—	—	952.2	955.3	954.8	—	0.14
反-3-壬烯	—	—	945.8	947.5	946.5	—	0.06
顺-4-壬烯	—	—	948.5	951.8	952.0	—	0.14
反-4-壬烯	—	—	939.2	941.2	940.7	—	0.09
1-癸烯		—	1048.5	1049.8	1051.7	1055.3	0.14
顺-2-癸烯	—	—	1073.7	1077.9	1080.7	1084.0	0.24
反-2-癸烯	—		1062.0	1064.1	1065.3	1066.3	0.11
顺-3-癸烯	—	—	1049.3	1051.9	1053.9	1056.6	0.16
反-3-癸烯	—	—	1043.9	1044.9	1046.2	1046.4	0.06
顺-4-癸烯	—	—	1044.2	1045.9	1050.3	1052.2	0.16
反-4-癸烯	—	—	1037.3	1038.8	1039.2	1040.3	0.08
顺-5-癸烯	—	—	1041.9	—	1047.0	1047.7	0.08
反-5-癸烯	—	—	1038.7	1040.4	1040.7	1042.6	0.09
1-十一烯		—	—	1148.4	1151.2	1153.6	0.13
顺-2-十一烯	—	—	—	1176.4	1179.3	1183.0	0.17
反-2-十一烯	—	—	—	1161.1	1163.8	1166.5	0.14
顺-3-十一烯	—	—		1151.7	1151.8	1154.5	0.07
反-3-十一烯	—	—	—	1145.5	1145.7	1146.7	0.03
顺-4-十一烯	—	—	—	1145.6	1145.8	1149.6	0.10
反-4-十一烯	—		—	1137.7	1136.9	1139.3	0.08
顺-5-十一烯	—	—	—	1142.1	1143.4	1146.9	0.12
反-5-十一烯	—	—	—	1137.7	1138.7	1139.7	0.05
1-十二烯	—	—	—	—	1252.8	1254.9	0.09
顺-2-十二烯	—	—	—	—	1281.5	1283.3	0.09
反-2-十二烯	—	—	—	—	1266.5	1267.5	0.05
顺-3-十二烯	—	—	—	—	1254.1	1255.7	0.08
顺-4-十二烯	—	—	—	—	1247.3	1248.8	0.08
反-4-十二烯	—	—		—	1236.9	1238.4	0.08
顺-5-十二烯	—	—		—	1243.1	1244.3	0.06
反-5-十二烯	—		—	—	1239.4	1239.8	0.02
顺-6-十二烯	—	—	—	—	1239.8	1243.7	0.20
反-6-十二烯	—	—	—	—	1235.9	1237.6	0.09

表 13-33　$C_6 \sim C_{14}$烯烃保留指数（一）[28]

固定液：角鲨烷

化合物 \ 柱温/℃ (I)	86	100	115	130
己烯	583.1	583.8	584.0	
反-3-己烯	591.5	591.1	590.6	—
顺-3-己烯	593.0	593.3	593.7	—
反-2-己烯	596.7	596.5	596.4	—
顺-2-己烯	604.6	604.9	605.4	—
庚烯	682.8	683.1	683.5	—
反-3-庚烯	687.5	687.4	687.4	—
顺-3-庚烯	691.7	692.0	692.3	—
反-2-庚烯	698.7	698.7	698.7	—
顺-2-庚烯	704.3	704.7	705.1	—
辛烯	782.3	782.6	782.6	—
反-4-辛烯	784.2	784.1	784.1	—
顺-4-辛烯	787.9	788.2	788.6	—
反-3-辛烯	788.4	788.2	788.0	—
顺-3-辛烯	789.5	789.8	790.2	—
反-2-辛烯	797.7	797.5	797.3	—
顺-2-辛烯	802.8	803.2	803.6	—
壬烯	882.2	882.5	882.8	—
反-4-壬烯	884.2	884.2	884.4	—
顺-4-壬烯	881.8	885.4	886.0	—
反-3-壬烯	886.6	886.4	886.5	—
顺-3-壬烯	887.0	887.5	888.1	—
反-2-壬烯	896.6	896.4	896.6	—
顺-2-壬烯	901.5	901.9	902.6	—
顺-5-癸烯	981.0	981.6	982.1	—
反-4-癸烯	982.2	982.5	982.1	—
癸烯	982.2	982.5	982.7	—
顺-4-癸烯	982.2	982.8	983.4	—
反-3-癸烯	984.0	984.1	984.7	—
反-3-癸烯	985.4	985.5	985.5	—
顺-3-癸烯	985.4	985.8	986.4	—
反-2-癸烯	996.7	996.7	996.6	—
顺-2-癸烯	1001.2	1001.7	1002.2	—
顺-5-十一烯	1077.6	1078.2	1078.9	1080.5
顺-4-十一烯	1079.9	1080.5	1081.1	1082.5
反-4-十一烯	1081.0	1081.1	1081.2	1082.5
反-5-十一烯	1081.6	1081.8	1082.0	1083.5
十一烯	1082.2	1082.4	1082.6	1083.5
顺-3-十一烯	1084.7	1085.3	1085.8	1086.6
反-3-十一烯	1085.5	1085.4	1085.3	1085.5
反-2-十一烯	1096.6	1096.6	1096.5	1096.7
顺-2-十一烯	1101.7	1101.5	1101.9	1102.7
顺-6-十二烯	1173.8	1175.0	1176.0	1176.9
顺-5-十二烯	1174.6	1175.6	1176.6	1177.5
反-6-十二烯	1178.7	1179.6	1180.[illegible]	1180.6
顺-4-十二烯	1178.7	1179.6	1180.6	1181.6
反-5-十二烯	1179.8	1180.6	1181.1	1181.6
反-4-十二烯	1180.1	1180.6	1181.1	1181.6
十二烯	1182.3	1183.0	1183.4	1183.8
顺-3-十二烯	1184.1	1185.1	1185.7	1186.2
反-3-十二烯	1185.0	1185.1	1185.2	1185.3
反-2-十二烯	1196.9	1196.9	1196.9	1196.8
顺-2-十二烯	1201.1	1201.7	1202.3	1202.8
顺-6-十三烯	1270.2	1271.2	1272.5	1273.1
顺-5-十三烯	1272.8	1273.8	1275.0	1275.9
反-6-十三烯	1276.7	1277.4	1278.1	1278.7
顺-4-十三烯	1277.7	1278.6	1279.8	1280.7
反-5-十三烯	1279.0	1279.5	1280.3	1280.7
反-4-十三烯	1279.6	1279.9	1280.3	1280.7
十三烯	1282.8	1283.1	1283.5	1283.8
顺-3-十三烯	1283.7	1284.4	1285.1	1285.6
反-3-十三烯	1284.9	1284.9	1285.1	1285.1
反-2-十三烯	1296.9	1297.0	1297.0	1296.9
顺-2-十三烯	1301.0	1301.6	1302.2	1303.7
顺-7-十四烯	—	1366.7	—	1369.5
顺-6-十四烯	—	1368.6	—	1371.3
顺-5-十四烯	—	1372.0	—	1374.6
反-7-十四烯	—	1374.5	—	1376.4
反-6-十四烯	—	1375.7	—	1377.5
顺-4-十四烯	—	1377.7	—	1379.9
反-5-十四烯	—	1378.4	—	1379.9
反-4-十四烯	—	1379.3	—	1380.4
十四烯	—	1383.2	—	1384.0
顺-3-十四烯	—	1384.1	—	1385.4
反-3-十四烯	—	1384.6	—	1384.9
反-2-十四烯	—	1396.9	—	1397.0
顺-2-十四烯	—	1401.5	—	1402.8

表 13-34　$C_6 \sim C_{14}$烯烃保留指数（二）[52]

固定液：聚苯乙醚

柱温/℃	20	30	40	60	80	100	120	140	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
化合物 \ 保留指数	*I*								
己烯	619.1	620.2	620.9	—	624.4	626.2	—	—	0.87
顺-3-己烯	628.8	630.3	630.6	—	634.2	636.0	—	—	0.86

续表

柱温/°C 保留指数 化合物	20	30	40	60	80	100	120	140	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
					I				
反-3 己烯	632.3	631.7	631.5	—	629.9	629.1	—	—	0.37
反-2 己烯	635.3	635.6	635.4	—	636.3	636.8	—	—	0.20
顺-2 己烯	643.1	643.8	644.6	—	647.6	649.1		—	0.70
庚烯	718.1	718.4	718.7	719.2	719.9	720.4	—	—	0.29
反-3-庚烯	724.3	724.0	723.7	723.5	723.3	722.9	—	—	−0.16
顺 3-庚烯	726.8	726.5	727.5	729.2	729.9	731.0	—	—	0.59
反-2-庚烯	735.8	735.6	736.3	736.9	737.3	737.8	—	—	0.25
顺-2-庚烯	742.5	742.8	743.5	744.1	745.1	746.1	—	—	0.46
辛烯	—	—	817.9	818.9	820.1	821.2	—	—	0.55
反 4 辛烯	—	—	818.3	818.9	819.2	820.0	—	—	0.30
顺 4 辛烯	—	—	822.5	823.8	825.6	827.2	—	—	0.79
顺-3-辛烯	—	—	824.3	826.1	826.3	827.7	—	—	0.53
反-3-辛烯	—	—	824.8	825.5	825.5	826.0	—	—	0.17
反-2-辛烯	—	—	835.6	836.7	837.6	838.7	—	—	0.50
顺-2-辛烯	—	—	841.8	843.1	845.4	846.8	—	—	0.87
壬烯	—	—	918.3	918.6	919.8	920.1	—	—	0.38
反-4-壬烯	—	—	918.5	918.9	919.7	920.2	—	—	0.32
顺-4-壬烯	—	—	919.0	920.1	922.2	923.3	—	—	0.75
顺-3-壬烯	—	—	922.7	923.7	924.7	925.5	—		0.52
反 3-壬烯	—	—	924.2	924.2	924.4	924.5	—	—	0.05
反-2-壬烯	—	—	935.2	935.3	936.4	936.5	—	—	0.25
顺-2 壬烯	—	—	941.0	941.6	943.5	944.2	—	—	0.60
顺 5-癸烯	—	—	—	1014.6	1016.8	1018.2	—	—	0.90
反-4 癸烯	—	—	—	1017.2	1017.6	1018.4	—	—	0.35
顺 4-癸烯	—	—	—	1017.2	1018.8	1020.1		—	0.78
癸烯	—	—	—	1018.0	1019.4	1020.2	—	—	0.47
反-5-癸烯	—	—	—	1018.3	1019.3	1020.1	—	—	0.47
顺-3-癸烯	—	—	—	1021.3	1022.9	1023.9	—	—	0.62
反-3-癸烯	—	—	—	1022.8	1023.1	1023.3	—	—	0.10
反-2-癸烯	—	—	—	1035.7	1036.6	1036.5	—	—	0.20
顺-2-癸烯		—	—	1041.0	1042.8	1043.8	—	—	0.72
顺-5-十一烯	—	—	—	1111.7	1113.1	1114.7	1116.0	—	0.75
顺-4-十一烯	—	—	—	1114.3	1116.0	1117.4	1119.0	—	0.82
反-4-十一烯	—	—	—	1115.3	1116.1	1117.0	1117.7	—	0.40
反-5-十一烯	—	—	—	1116.3	1116.9	1117.7	1118.2	—	0.38
十一烯	—	—	—	1118.0	1119.0	1119.8	1120.6	—	0.45
顺-3-十一烯	—	—	—	1120.1	1121.0	1122.8	1123.7	—	0.65
反-3-十一烯	—	—	—	1122.6	1122.7	1123.0	1123.1	—	0.10
反-2-十一烯	—		—	1135.5	1135.2	1136.4	1136.7	—	0.25
顺-2-十一烯	—	—	—	1140.6	1141.8	1143.5	1144.8	—	0.75
顺 6 十二烯		—	—	—	1210.1	1211.8	1213.7	—	0.92
顺-5 十二烯	—	—	—	—	1210.4	1212.0	1213.9	—	0.88
反-6-十二烯	—	—	—		1214.9	1216.3	1218.1	—	0.82
顺-4-十二烯	—	—	—	—	1215.0	1216.5	1219.0	—	0.90
反-5-十二烯	—	—	—	—	1215.1	1216.9	1217.5	—	0.58
反 4-十二烯	—	—	—	—	1215.6	1216.4	1217.0	—	0.35
十二烯	—	—	—	—	1219.1	1220.1	1221.0	—	0.52

续表

柱温/℃ 保留指数 \ 化合物	20	30	40	60	80	100	120	140	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
	I								
顺-3-十二烯	—	—	—	—	1220.8	1222.3	1223.6	—	0.72
反-3-十二烯	—	—	—	—	1222.3	1222.6	1222.9	—	0.15
反-2-十二烯	—	—	—	—	1235.6	1236.3	1237.3	—	0.40
顺-2-十二烯	—	—	—	—	1242.1	1243.5	1244.9	—	0.72
顺-6-十三烯	—	—	—	—	—	1307.6	1310.2	1312.3	1.17
顺-5-十三烯	—	—	—	—	—	1309.2	1311.8	1313.7	1.10
反-6-十三烯	—	—	—	—	—	1313.8	1315.5	1316.0	0.58
顺-4-十三烯	—	—	—	—	—	1314.7	1316.4	1319.0	1.01
反-5-十三烯	—	—	—	—	—	1314.7	1316.9	1317.7	0.77
反-4-十三烯	—	—	—	—	—	1315.4	1316.6	1316.8	0.35
十三烯	—	—	—	—	—	1319.3	1321.0	1322.3	0.75
顺-3-十三烯	—	—	—	—	—	1322.0	1322.7	1324.6	0.65
反-3-十三烯	—	—	—	—	—	1322.1	1323.1	1323.3	0.28
反-2-十三烯	—	—	—	—	—	1335.0	1337.1	1337.3	0.55
顺-2-十三烯	—	—	—	—	—	1341.5	1344.5	1346.3	1.12
顺-7-十四烯	—	—	—	—	—	1403.6	1406.3	1408.6	1.25
顺-6-十四烯	—	—	—	—	—	1405.3	1408.0	1410.3	1.25
顺-5-十四烯	—	—	—	—	—	1408.4	1411.0	1412.5	1.07
反-7-十四烯	—	—	—	—	—	1411.3	1413.4	1414.4	0.80
反-6-十四烯	—	—	—	—	—	1412.4	1414.3	1415.2	0.70
反-5-十四烯	—	—	—	—	—	1414.1	1415.6	1416.3	0.52
顺-4-十四烯	—	—	—	—	—	1414.4	1416.6	1417.5	0.82
反-4-十四烯	—	—	—	—	—	1415.0	1415.8	1416.4	0.38
十四烯	—	—	—	—	—	1419.6	1422.1	1422.8	0.82
反-3-十四烯	—	—	—	—	—	1422.0	1422.4	1422.5	0.12
反-2-十四烯	—	—	—	—	—	1435.6	1436.4	1437.0	0.38

表 13-35 C_9～C_{20}烯烃保留指数[122]

柱温：240℃

固定液 *I* \ 化合物	DB-1	CP-Sil5	DB-WAX	CP-WAX52
1-壬烯	—	956.2	—	—
1-癸烯	—	1039.3	—	—
1-十三烯	1288.8	1319.3	1352.6	1373.1
1-十四烯	1387.9	1410.7	1453.9	1474.0
1-十六烯	1586.0	1600.8	1654.8	1665.9
1-十七烯	1690.2	1697.7	1754.5	1762.1
1-十八烯	1790.7	1799.2	1855.8	1862.2
1-十九烯	1891.5	1899.2	1956.3	1959.7
1-二十烯	1990.7	1996.7	2055.9	2057.5

表 13-36 C_{11}烯烃保留指数[40]

固定液：角鲨烷

柱温/℃ *I* \ 化合物	100	柱温/℃ *I* \ 化合物	100
顺-5-十一烯	1078.2	顺-3-十一烯	1085.3
顺-4-十一烯	1080.5	反-3-十一烯	1085.4
1-十一烯	1082.4	反-2-十一烯	1096.6
反-5-十一烯	1081.1	顺-2-十一烯	1101.5
反-4-十一烯	1081.8		

表 13-37 C_{12}～C_{14}烯烃保留指数[52]

固定液：聚乙二醇 4000

柱温/℃	100	120	140	160	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
保留指数 / 化合物	I				
反-6-十二烯	1236.0	1237.0	1238.2	1239.5	0.58
反-5-十二烯	1237.2	1237.6	1238.9	1239.7	0.42
反-4-十二烯	1237.7	1238.4	1238.9	1239.4	0.30
顺-6-十二烯	1239.8	1241.6	1243.7	1245.6	1.00
顺-5-十二烯	1240.2	1241.9	1243.8	1245.7	0.92
顺-4-十二烯	1245.0	1247.0	1248.2	1250.2	0.85
反-3-十二烯	1245.9	1246.1	1246.1	1246.2	0.05
十二烯	1251.1	1252.1	1253.2	1253.9	0.48
顺-3-十二烯	1252.1	1253.6	1255.5	1257.2	0.86
反 2 十二烯	1265.4	1265.9	1266.1	1266.7	0.22
顺-2-十二烯	1279.4	1281.4	1282.8	1285.4	1.00
反-6-十三烯	1333.4	1334.6	1335.7	1336.9	0.55
反-5-十三烯	1336.2	1337.0	1337.6	1338.3	0.35
反-4-十三烯	1336.6	1337.3	1337.9	1338.7	0.35
顺-6-十三烯	1335.0	1337.3	1339.5	1341.6	1.12
顺-5-十三烯	1338.3	1340.0	1341.9	1343.3	0.88
顺 4 十三烯	1343.7	1345.6	1347.1	1349.1	0.88
反-3-十三烯	1345.3	1345.5	1345.7	1346.0	0.10
十三烯	1351.3	1352.2	1353.1	1354.0	0.46
顺-3-十三烯	1351.8	1353.0	1354.6	1355.7	0.67
反-2-十三烯	1364.7	1365.2	1365.3	1366.1	0.20
顺-2-十三烯	1378.9	1381.0	1382.3	1384.6	0.92
反-7-十四烯	1430.8	1432.2	1433.6	1435.0	0.72
顺-7-十四烯	1430.7	1432.9	1435.1	1437.4	1.12
反-6-十四烯	1432.4	1433.3	1434.5	1435.3	0.50
顺 6 十四烯	1433.2	1435.0	1437.2	1438.6	0.92
反-5-十四烯	1435.2	1435.9	1437.1	1437.7	0.45
顺-5-十四烯	1435.9	1438.2	1440.6	1442.9	1.18
反-4-十四烯	1436.2	1436.8	1437.8	1438.2	0.34
顺-4-十四烯	1443.2	1444.9	1447.0	1448.6	0.92
反-3-十四烯	1445.0	1445.3	1445.8	1446.1	0.18
十四烯	1451.4	1452.2	1453.4	1454.1	0.47
反-2-十四烯	1465.1	1465.6	1466.2	1466.5	0.23

表 13-38 C_{13}烯烃保留指数[11]

固定液：角鲨烷　　柱温：130℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
2-甲基十二烷	1264.1	4-甲基-1-十二烯	1242.2	11-甲基-1-十二烯	1247.2
3-甲基十二烷	1270.1	5-甲基-1-十二烯	1237.9	1-十三烯	1283.2
4-甲基十二烷	1258.3	6-甲基-1-十二烯	1233.9	反-2-十三烯	1296.2
5-甲基十二烷	1252.4	7-甲基-1-十二烯	1232.5	顺-2-十三烯	1302.2
6-甲基十二烷	1249.9	8-甲基-1-十二烯	1235.9	正癸基环丙烷	1318.2
2-甲基-1-十二烯	1274.9	9-甲基-1-十二烯	1241.4		
3-甲基-1-十二烯	1239.3	10-甲基-1-十二烯	1253.1		

表 13-39 C_{13}、C_{14}烯烃保留指数[86]

柱温：74℃

固定液	PBO①		角鲨烷		固定液	PBO①		角鲨烷	
指数 / 化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	指数 / 化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
顺-6-十三烯	1275.2	0.49	1270.1	0.73	顺-6-十四烯	1371.0	0.48	1367.4	0.90
顺-5-十三烯	1278.7	0.46	1272.8	0.70	顺-5-十四烯	1376.4	0.38	1370.9	0.87
顺-4-十三烯	1285.0	0.42	1276.5	0.68	顺-4-十四烯	1383.0	0.30	1376.8	0.70
顺-3-十三烯	1295.3	0.32	1283.5	0.43	顺-3-十四烯	1394.7	0.34	1383.4	0.43
顺-2-十三烯	1319.8	0.02	1301.5	0.38	顺-2-十四烯	1419.5	0.09	1401.6	0.43
反-6-十三烯	1286.4	0.29	1276.8	0.45	反-7-十四烯	1381.7	0.21	1373.6	0.63
反-5-十三烯	1288.1	0.23	1279.0	0.39	反-6-十四烯	1384.4	0.19	1375.0	0.60
反-4-十三烯	1291.0	0.21	1279.9	0.25	反-5-十四烯	1386.0	0.20	1377.8	0.50
反-3-十三烯	1298.4	0.19	1285.6	−0.05	反-4-十四烯	1390.0	0.10	1379.1	0.37
反-2-十三烯	1317.8	0.09	1297.7	0.00	反-3-十四烯	1397.5	0.16	1385.2	0.10
1-十三烯	1306.4	0.10	1288.7	0.23	反-2-十四烯	1417.9	0.09	1397.7	0.03
顺-7-十四烯	1369.9	0.43	1365.5	0.93	1-十四烯	1406.3	0.13	1383.4	0.27

①PBO是4-正戊基苯乙酮-(O-4-正戊氧基苯甲酰肟)

表 13-40 C_{15}烯烃保留指数[77]

柱温：130℃

固定液	C_{87}烃		角鲨烷		固定液	C_{87}烃		角鲨烷	
指数 / 化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	指数 / 化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
顺-7-十五烯	1466.5	1.10	1467.0	0.93	反-4-十五烯	1479.2	0.40	1479.8	0.37
顺-6-十五烯	1469.1	1.00	1469.3	0.90	反-3-十五烯	1484.1	0.20	1484.8	0.10
顺-5-十五烯	1473.2	0.90	1473.5	0.87	1-十五烯	1485.4	0.50	1484.1	0.27
反-7-十五烯	1474.1	0.70	1474.8	0.63	顺-3-十五烯	1485.6	0.70	1485.3	0.43
反-6-十五烯	1475.5	0.60	1476.2	0.60	反-2-十五烯	1498.3	0.16	1497.0	0.03
顺-4-十五烯	1479.2	0.80	1479.3	0.70	顺-2-十五烯	1504.7	0.70	1502.8	0.43
反-5-十五烯	1478.4	0.50	1479.3	0.50					

表 13-41 C_{15}、C_{16}烯烃保留指数[33]

固定液：角鲨烷　　柱温：130℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
顺-7-十五烯	1467.7	顺-3-十五烯	1486.0	反-6-十六烯	1575.3
顺-6-十五烯	1470.0	反-2-十五烯	1497.5	顺-4-十六烯	1578.8
顺-5-十五烯	1474.2	正十五烯	1500.0	反-5-十六烯	1578.8
反-7-十五烯	1475.5	顺-2-十五烯	1503.6	反-4-十六烯	1579.7
反-6-十五烯	1476.7	顺-8-十六烯	1564.3	1-十六烯	1584.4
顺-4-十五烯	1479.7	顺-7-十六烯	1565.0	反-3-十六烯	1584.9
反-5-十五烯	1479.7	顺-6-十六烯	1568.1	顺-3-十六烯	1585.5
反-4-十五烯	1480.2	反-8-十六烯	1571.7	反-2-十六烯	1597.0
1-十五烯	1484.7	顺-5-十六烯	1573.0	正十六烷	1600.0
反-3-十五烯	1485.3	反-7-十六烯	1573.6	顺-2-十六烯	1603.7

表 13-42 C_{15}～C_{18}烯烃保留指数[72]

固定液	八十七烷		Apiezon L		Carbowax 20M	
柱温/℃	160		154		110	
化合物 \ 保留指数	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$
顺-7-十五烯	1469.8	0.11	1470.9	0.09	1506.6	0.25
顺-6-十五烯	1472.2	0.10	1473.3	0.08	1508.9	0.25
反-7-十五烯	1476.3	0.07	1477.2	0.06	1511.0	0.18
顺-5-十五烯	1476.3	0.09	1477.2	0.07	1512.7	0.24
反-6-十五烯	1477.4	0.06	1478.3	0.05	1512.4	0.17
反-5-十五烯	1480.3	0.05	1481.2	0.03	1515.4	0.16
反-4-十五烯	1480.3	0.04	1481.2	0.03	1516.2	0.13
顺-4-十五烯	1481.7	0.08	1482.8	0.07	1518.2	0.23
反-3-十五烯	1484.6	0.02	1485.7	0.00	1522.8	0.13
1-十五烯	1486.7	0.04	1488.0	0.03	1526.7	0.16
顺-3-十五烯	1487.6	0.07	1488.8	0.06	1525.0	0.22
反-2-十五烯	1498.8	0.01	1500.0	0.00	1537.4	0.17
顺-2-十五烯	1506.8	0.06	1508.3	0.05	1546.0	0.27
顺-8-十六烯	1567.2	0.11	1568.1	0.09	1602.6	0.25
顺-7-十六烯	1567.5	0.11	1568.3	0.09	1603.3	0.25
顺-6-十六烯	1570.8	0.10	1571.9	0.08	1606.6	0.25
反-8-十六烯	1574.7	0.08	1575.3	0.07	1608.1	0.18
反-7-十六烯	1574.7	0.08	1575.7	0.07	1608.6	0.17
顺-5-十六烯	1575.2	0.09	1576.6	0.08	1610.9	0.24
反-6-十六烯	1576.6	0.06	1577.5	0.06	1610.7	0.17
反-5-十六烯	1579.3	0.05	1580.5	0.05	1613.5	0.15
反-4-十六烯	1579.9	0.04	1581.1	0.03	1615.0	0.12
顺-4-十六烯	1581.2	0.08	1582.5	0.07	1616.6	0.23
反-3-十六烯	1584.6	0.02	1585.7	0.00	1621.8	0.13
1-十六烯	1586.8	0.04	1588.1	0.03	1625.7	0.16
顺-3-十六烯	1587.4	0.07	1588.8	0.06	1624.0	0.22
反-2-十六烯	1598.8	0.01	1600.0	0.00	1636.2	0.17
顺-2-十六烯	1606.7	0.06	1608.5	0.06	1644.5	0.27
顺-8-十七烯	1664.4	0.12	1665.6	0.10	1699.2	0.27
顺-7-十七烯	1665.9	0.11	1667.0	0.10	1700.9	0.26
顺-6-十七烯	1669.6	0.11	1670.9	0.09	1704.2	0.25
反-8-十七烯	1673.0	0.09	1674.0	0.06	1705.3	0.18
反-7-十七烯	1673.6	0.08	1674.8	0.06	1706.3	0.17
顺-5-十七烯	1674.9	0.09	1676.0	0.08	1709.1	0.24
反-6-十七烯	1675.9	0.07	1676.8	0.05	1708.9	0.17
反-5-十七烯	1679.2	0.05	1680.1	0.04	1712.0	0.16
反-4-十七烯	1680.0	0.04	1681.0	0.03	1713.7	0.13
顺-4-十七烯	1681.2	0.08	1682.3	0.07	1715.0	0.23
反-3-十七烯	1684.6	0.02	1685.7	0.00	1720.5	0.12
1-十七烯	1686.8	0.04	1687.6	0.04	1724.6	0.15
顺-3-十七烯	1687.1	0.07	1688.7	0.06	1722.6	0.21
反-2-十七烯	1698.8	0.01	1700.0	0.00	1735.0	0.16
顺-2-十七烯	1706.9	0.07	1708.6	0.06	1742.8	0.26
顺-9-十八烯	1761.5	0.12	1762.4	0.11	1795.0	0.27
顺-8-十八烯	1762.4	0.12	1763.1	0.11	1795.8	0.26
顺-7-十八烯	1764.6	0.11	1765.3	0.10	1798.1	0.25

续表

固定液	八十七烷		Apiezon L		Carbowax 20M	
柱温/℃	160		154		110	
化合物 \ 保留指数	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$
顺-6-十八烯	1769.0	0.10	1769.6	0.09	1802.5	0.24
反-9-十八烯	1771.3	0.09	1771.7	0.08	1803.3	0.18
反-8-十八烯	1771.8	0.08	1772.2	0.08	1803.3	0.18
反-7-十八烯	1773.1	0.08	1773.6	0.07	1805.0	0.16
顺-5-十八烯	1774.4	0.09	1775.2	0.08	1807.2	0.23
反-6-十八烯	1775.4	0.07	1775.9	0.06	1807.6	0.15
反-5-十八烯	1778.9	0.05	1779.5	0.05	1811.2	0.14
反-4-十八烯	1780.0	0.04	1780.6	0.03	1813.2	0.12
顺-4-十八烯	1781.0	0.08	1781.8	0.07	1814.2	0.21
反-3-十八烯	1784.7	0.02	1785.3	0.01	1820.1	0.12
1-十八烯	1786.8	0.04	1787.8	0.04	1824.0	0.15
顺-3-十八烯	1787.5	0.07	1788.4	0.06	1821.8	0.20
反-2-十八烯	1798.9	0.01	1800.0	0.00	1834.1	0.16
顺-2-十八烯	1807.0	0.07	1808.6	0.06	1841.7	0.26

表 13-43　C_7、C_8 二烯烃保留指数[73]

固定液：角鲨烷　　柱温：70℃

化合物	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	化合物	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$
1,6-庚二烯	668.3	0.070	1,反-6-辛二烯	783.3	0.037
1,反-4-庚二烯	677.2	-0.005	1,顺-6-辛二烯	787.9	0.070
1,顺-4-庚二烯	678.6	0.045	反-2,反-6-辛二烯	796.0	-0.018
1,反-5-庚二烯	681.9	0.013	反-2,顺-5-辛二烯	796.9	0.020
1,顺-5-庚二烯	688.1	0.055	反-2,反-5-辛二烯	798.6	-0.030
反-2,反-5-庚二烯	708.3	-0.020	顺-2,顺-5-辛二烯	800.6	0.060
反-2,顺-5-庚二烯	712.3	0.005	反-2,顺-6-辛二烯	801.6	0.022
1,反-3-庚二烯	713.1	0.035	顺-2,反-5-辛二烯	801.7	0.015
顺-2,顺-5-庚二烯	716.4	0.060	顺-2,顺-6-辛二烯	808.4	0.068
1,顺-3-庚二烯	716.5	0.050	1,反-3-辛二烯	815.4	0.050
反-2,顺-4-庚二烯	745.4	0.020	1,顺-3-辛二烯	816.0	0.065
反-2,反-4-庚二烯	746.5	0.040	反-3,顺-5-辛二烯	835.9	0.013
顺-2,反-4-庚二烯	751.1	0.020	顺-3,顺-5-辛二烯	841.4	0.030
顺-2,顺-4-庚二烯	754.6	0.035	反-2,顺-4-辛二烯	841.4	0.030
1,7-辛二烯	767.8	0.060	反-2,反-4-辛二烯	843.3	0.040
1,反-4-辛二烯	771.7	0.020	反-3,反-5-辛二烯	843.3	0.040
1,反-5-辛二烯	772.6	0.022	顺-2,反-4-辛二烯	846.3	0.023
1,顺-5-辛二烯	773.5	0.053	顺-2,顺-4-辛二烯	851.9	0.045
1,顺-4-辛二烯	775.5	0.055			

表 13-44　C_8～C_{10}二烯烃保留指数[99]

固定液：角鲨烷　　柱温：70℃

化合物	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	化合物	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$
1,7-辛二烯	763.5	0.045	1,顺-5-辛二烯	769.2	0.040
1,反-5-辛二烯	768.3	0.015	1,顺-4-辛二烯	771.6	0.050
1,反-4-辛二烯	769.0	0.020	1,反-6-辛二烯	779.3	0.035

续表

化合物	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	化合物	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$
1,顺-6-辛二烯	783.5	0.055	顺-2,反-4-壬二烯	942.6	0.050
反-2,反-6-辛二烯	792.3	−0.010	顺-2,顺-4-壬二烯	945.8	0.060
反-2,顺-5-辛二烯	792.7	0.025	1,顺-5-癸二烯	961.4	0.065
反-2,反-5-辛二烯	795.2	−0.020	1,反-6-癸二烯	962.3	0.030
顺-2,顺-5-辛二烯	796.5	0.060	1,顺-6-癸二烯	962.5	0.070
顺-2,反-5-辛二烯	797.8	0.015	1,9-癸二烯	964.0	0.030
反-2,顺-6-辛二烯	798.0	0.030	1,反-5-癸二烯	964.0	0.030
顺-2,顺-6-辛二烯	804.0	0.065	1,顺-4-癸二烯	964.5	0.045
1,反-3-辛二烯	810.5	0.050	1,反-4-癸二烯	965.5	0.035
1,顺-3-辛二烯	810.5	0.065	1,顺-7-癸二烯	967.1	0.065
反-3,顺-5-辛二烯	830.6	0.030	1,反-7-癸二烯	967.8	0.030
顺-3,顺-5-辛二烯	835.9	0.040	反-3,顺-7-癸二烯	970.1	0.010
反-2,顺-4-辛二烯	835.9	0.040	顺-3,顺-7-癸二烯	970.9	0.040
反-2,反-4-辛二烯	837.9	0.055	反-3,反-7-癸二烯	972.3	0.035
反-3,反-5-辛二烯	838.1	0.055	反-3,顺-6-癸二烯	974.0	0.035
顺-2,反-4-辛二烯	840.6	0.045	顺-3,反-6-癸二烯	974.0	0.035
顺-2,顺-4-辛二烯	846.3	0.060	反-2,反-6-癸二烯	976.4	0.015
1,8-壬二烯	862.7	0.050	顺-3,顺-6-癸二烯	976.4	–
1,反-5-壬二烯	864.5	0.040	1,反-8-癸二烯	977.1	0.035
1,顺-5-壬二烯	865.6	0.070	反-3,反-6-癸二烯	977.9	0.030
1,顺-6-壬二烯	868.0	0.070	反-2,顺-6-癸二烯	978.5	0.035
1,顺-4-壬二烯	868.1	0.070	反-2,顺-7-癸二烯	980.1	0.045
1,反-6-壬二烯	869.1	0.030	1,顺-8-癸二烯	981.1	0.060
1,反-4-壬二烯	869.9	0.020	顺-2,反-6-癸二烯	982.3	0.050
1,反-7-壬二烯	879.1	0.020	顺-2,顺-6-癸二烯	983.3	0.070
反-3,顺-6-壬二烯	881.4	0.030	反-2,反-7-癸二烯	984.6	0.015
反-2,反-6-壬二烯	881.6	−0.010	顺-2,顺-7-癸二烯	985.3	0.075
顺-3,顺-6-壬二烯	882.0	0.040	反-2,顺-5-癸二烯	985.3	0.030
1,顺-7-壬二烯	883.6	0.060	顺-2,反-7-癸二烯	986.8	0.045
反-2,顺-6-壬二烯	883.6	0.040	顺-2,顺-5-癸二烯	988.1	0.070
反-3,反-6-壬二烯	884.0	0.025	反-2,反-5-癸二烯	990.0	−0.005
顺-2,反-6-壬二烯	887.2	0.035	顺-2,反-5-癸二烯	992.9	0.035
顺-2,顺-6-壬二烯	887.9	0.070	反-2,反-8-癸二烯	995.4	−0.005
反-2,顺-5-壬二烯	887.9	0.040	反-2,顺-8-癸二烯	998.7	0.040
反-2,反-5-壬二烯	889.2	0.000	顺-2,顺-8-癸二烯	1001.4	0.080
顺-2,顺-5-壬二烯	891.6	0.050	1,顺-3-癸二烯	1007.2	0.055
顺-2,反-5-壬二烯	892.4	0.035	1,反-3-癸二烯	1008.5	0.050
反-2,反-7-壬二烯	895.0	0.020	反-4,顺-6-癸二烯	1019.4	0.050
反-2,顺-7-壬二烯	897.0	0.040	反-3,顺-5-癸二烯	1022.8	0.035
顺-2,顺-7-壬二烯	900.6	0.080	顺-3,反-5-癸二烯	1026.6	0.040
1,顺-3-壬二烯	909.5	0.080	顺-4,顺-6-癸二烯	1028.3	0.075
1,反-3-壬二烯	909.7	0.060	反-4,反-6-癸二烯	1030.2	0.085
顺-3,反-5-壬二烯	925.0	0.030	顺-3,顺-5-癸二烯	1031.4	0.070
反-3,顺-5-壬二烯	925.0	0.030	反-2,顺-4-癸二烯	1032.0	0.055
顺-3,顺-5-壬二烯	932.3	0.055	反-3,反-5-癸二烯	1037.4	0.075
反-3,反-5-壬二烯	934.5	0.050	反-2,反-4-癸二烯	1040.5	0.075
反-2,顺-4-壬二烯	934.5	0.060	顺-2,反-4-癸二烯	1041.7	0.055
反-2,反-4-壬二烯	940.5	0.070	顺-2,顺-4-癸二烯	1043.8	0.070

表 13-45　部分烯烃及二烯烃保留指数[9]

固定液：角鲨烷

柱温/°C	30	50	70	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	柱温/°C	30	50	70	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
化合物 \ 保留指数	I				化合物 \ 保留指数	I			
1-戊烯	480.2	480.5	480.9	0.18	2,4-二甲基-1-戊烯	636.2	637.5	638.9	0.68
反-2-戊烯	500.3	500.0	499.8	-0.13	3-乙基-2-戊烯	696.2	696.9	697.6	0.36
顺-2-戊烯	504.5	504.6	504.7	0.06	4,4-二甲基-反-2-戊烯	614.6	614.6	614.5	-0.04
3-甲基-1-丁烯	448.3	448.8	449.4	0.27	4,4-二甲基-顺-2-戊烯	633.3	635.5	637.6	1.09
2-甲基-1-丁烯	487.1	487.1	487.1	0.00	2,3-二甲基-2-戊烯	701.8	702.9	704.1	0.57
2-甲基-2-丁烯	513.4	513.5	513.6	0.06	2,3,3-三甲基-1-丁烯	626.1	628.4	630.7	1.16
1-己烯	581.5	582.1	582.8	0.34	1-辛烯	780.3	780.9	781.5	0.27
反-2-己烯	597.2	597.5	597.8	0.15	反-4-辛烯	782.9	783.3	783.7	0.21
顺-2-己烯	602.9	603.6	604.3	0.35	2,2-二甲基-反-3-己烯	692.9	692.7	692.4	-0.13
反-3-己烯	592.3	592.0	591.6	-0.17	2,2-二甲基-顺-3-己烯	714.5	716.5	718.4	0.98
顺-3-己烯	591.8	592.4	592.9	0.28	2,3-二甲基-1-己烯	737.3	738.9	740.5	0.82
4-甲基-1-戊烯	547.8	549.0	550.2	0.60	2,4,4-三甲基-1-戊烯	701.3	703.9	706.5	1.29
4-甲基-反-2-戊烯	560.8	560.6	560.4	-0.10	2,4,4-三甲基-2-戊烯	714.1	715.1	716.3	0.47
4-甲基-顺-2-戊烯	555.3	555.7	556.1	0.21	2,3,4-三甲基-2-戊烯	764.6	765.5	766.3	0.43
2-甲基-1-戊烯	579.4	579.9	580.4	0.25	2-甲基-3-乙基-2-戊烯	776.7	778.2	779.7	0.74
2-甲基-2-戊烯	597.7	597.5	597.4	0.08	1,2-丁二烯	425.7	427.5	428.2	0.37
3-甲基-1-戊烯	549.5	551.2	552.9	0.86	1,4-戊二烯	460.8	461.9	462.6	0.32
2-乙基-1-丁烯	592.0	592.0	592.0	0.01	1-反-3-戊二烯	514.3	515.3	516.2	0.47
3-甲基-反-2-戊烯	612.1	612.4	612.8	0.17	1-顺-3-戊二烯	523.3	524.2	525.1	0.45
3,3-二甲基-1-丁烯	505.7	507.0	508.2	0.63	1,2-戊二烯	524.5	525.0	525.5	0.25
2,3-二甲基-1-丁烯	557.5	558.6	559.7	0.55	2,3-戊二烯	529.3	529.8	530.2	0.23
2,3-二甲基-2-丁烯	624.0	624.8	625.6	0.40	2-甲基-1,3-丁二烯	499.1	499.2	499.3	0.06
1-庚烯	681.2	681.8	682.3	0.27	3-甲基-1,2-丁二烯	509.8	510.1	510.3	0.12
反-2-庚烯	698.0	698.1	698.1	0.01	1,5-己二烯	561.7	562.5	563.3	0.40
顺-2-庚烯	701.9	702.5	703.1	0.29	1,反-4-己二烯	581.3	581.4	581.7	0.13
反-3-庚烯	687.0	686.8	686.6	-0.11	1,顺-4-己二烯	586.0	586.9	587.8	0.44
2-甲基-1-己烯	679.1	679.6	680.1	0.25	1,3-己二烯(反,顺)	610.8	611.6	612.5	0.42
1-甲基-1-己烯	656.3	657.7	659.1	0.71	反-2,反-4-己二烯	643.4	644.3	645.2	0.45
5-甲基-1-己烯	648.8	649.7	650.6	0.45	顺-2,反-4-己二烯	651.3	652.3	653.9	0.49
2-甲基-2-己烯	690.6	690.7	690.8	0.04	顺-2,顺-4-己二烯	659.1	660.1	661.1	0.49
3-甲基-顺-2-己烯	699.3	699.7	700.1	0.20	2-甲基-1,4-戊二烯	554.9	555.7	556.5	0.40
4-甲基-反-2-己烯	655.2	656.1	657.0	0.44	2-甲基-反-1,3-戊二烯	625.0	626.1	627.3	0.57
5-甲基-反-2-己烯	658.8	659.2	659.6	0.21	4-甲基-1,3-戊二烯	626.4	687.5	623.6	0.55
2-甲基-反-3-己烯	647.2	646.8	646.5	-0.16	3-甲基-顺-1,3-戊二烯	635.7	637.1	638.5	0.69
3-甲基-反-3-己烯	683.8	684.1	684.5	0.18	3-甲基-反-1,3-戊二烯	639.1	640.7	642.3	0.81
3,3-二甲基-1-戊烯	623.6	626.0	628.4	1.20	2,3-二甲基-1,3-丁二烯	597.5	593.4	599.2	0.43
4,4-二甲基-1-戊烯	602.8	604.7	606.6	0.95	2-乙基-1,3-丁二烯	609.6	610.3	611.0	0.35
2,3-二甲基-1-戊烯	648.2	650.1	652.0	0.96					

表 13-46　C_5 烯烃及二烯烃保留指数[61]

固定液：苯基缩水甘油醚

I 柱温/°C 化合物	室温	I 柱温/°C 化合物	室温
3-甲基-1-丁烯	493.1	顺-2-戊烯	564.2
戊烯	533.4	2-甲基-2-丁烯	573.9
2-甲基-1-丁烯	545.9	反-1,3-戊二烯	644.3
反-2-戊烯	554.6	顺-1,3-戊二烯	658.7

表 13-47　部分烯烃、二烯烃和三烯烃保留指数[81]

固定液：SE—30

I 柱温/℃ 化合物	80	130	I 柱温/℃ 化合物	80	130
1-戊烯	492		1,5-己二烯	575	575
1 己烯	589	593	1,4-己二烯	593	593
1 庚烯	689	690	1,3-己二烯	620	619
1 辛烯	789	789	反,反-2,4-己二烯	662	662
1-壬烯	889	889	顺,反-2,4-己二烯	673	—
1 癸烯	988	989	1,6 庚二烯	676	—
反-2 癸烯	990	991	1,7-辛二烯	777	778
反-4-癸烯	990	991	2-甲基-1,3-丁二烯	507	—
反-5-癸烯	1000	1000	2,3-二甲基-1,3-丁二烯	616	616
3 甲基 1 戊烯	561	557	反-1-甲基 1,3-戊二烯	632	630
2-甲基 1-戊烯	589	585	4-甲基-1,3 戊二烯	636	634
2-甲基-2-戊烯	606	600	2,4-二甲基-1,3-戊二烯	700	700
1,4-戊二烯	480	461	2,5-二甲基-2,4-己二烯	862	861
1,3-戊二烯	525	521	1,3,5-己三烯	647	648

表 13-48　C_5～C_{13}炔烃保留指数[129]

柱温：80℃

固定液	角鲨烷		液晶 PBO①		固定液	角鲨烷		液晶 PBO①	
保留指数 化合物	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	保留指数 化合物	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$
3 甲基-1-丁炔	435.5	0.00	512.8	−0.07	4,4 二甲基-2-己炔	719.5	−0.09	767.1	0.32
3,3-二甲基 1-丁炔	467.1	0.00	525.9	0.01	3,4-二甲基-1-己炔	726.7	—	—	
3-甲基 1 戊炔	539.4			—	3-甲基-1-庚炔	730.1	0.01	—	—
4 甲基-1-戊炔	550.3	0.02	633.2	0.04	4,5-二甲基-1-己炔	735.1	—	—	—
1-己炔	583.4	0.01	678.0	0.08	5,5-二甲基-2-己炔	740.0	0.00	—	—
3,3-二甲基-1-戊炔	589.3		—	—	2-庚炔	743.0	-0.03	820.4	0.16
4-甲基 2 戊炔	594.2	—	—	—	4-甲基 1 庚炔	749.9	0.05	—	—
4,4-二甲基-1-戊炔	600.3	0.09	—	—	6-甲基-1-庚炔	749.9	0.03	—	—
4,4-二甲基-2-戊炔	611.6	−0.12	658.4	0.20	2-甲基-3-庚炔	752.6	−0.10	800.3	0.12
3 己炔	623.1	−0.09	692.8	0.05	5-甲基 1 庚炔	759.7	0.07	—	—
3,4 二甲基-1-戊炔	623.5	0.07	—	—	5-甲基-3-庚炔	756.9	−0.07	—	—
3-甲基 1 己炔	634.3	0.02			4,5 二甲基-2-己炔	760.4	0.03		
2 己炔	640.3	−0.04	718.9	0.05	6-甲基-3-庚炔	776.7	0.04	833.4	0.22
5 甲基-1-己炔	653.6	0.05	—	—	4 甲基 2-庚炔	780.6	0.07		—
4 甲基-1-己炔	659.3	0.07	—	—	1 辛炔	783.0	0.02	879.4	0.06
2-甲基 3-己炔	660.2	−0.12	713.2	0.15	4,4,5 三甲基-2-己炔	806.01	-0.02	849.7	0.38
2,2-二甲基-3-己炔	674.6	−0.15	707.1	0.17	4,4-二甲基-2-庚炔	806.5	−0.12	850.4	0.31
3,3-二甲基-1-己炔	678.8	—	—	—	6-甲基 2-庚炔	807.8	-0.02		-
1-庚炔	683.6	0.01	779.1	0.06	5-甲基-2-庚炔	811.1	0.00	—	—
2,5-二甲基-3-己炔	688.9	−0.16	723.2	0.10	4-辛炔	811.3	−0.05	872.1	0.14
3,5-二甲基-1-己炔	689.6	—	—	—	6,6-二甲基-3-庚炔	813.6	0.01	856.6	0.35
4-甲基-2 己炔	689.8			—	5,5,4-三甲基-2-己炔	816.5	0.01	863.2	0.45
2,2,5-三甲基-3-己炔	695.6	-0.18	707.8	0.05	3-辛炔	818.0	−0.06	880.5	0.17
5,5-二甲基 1 己炔	699.6	-	—	—	2,2,6-三甲基-3-庚炔	822.7	−0.09	838.6	0.30
5-甲基-2-己炔	701.2	−0.03	771.0	0.22	4 乙基 4 甲基-2-己炔	825.3	-0.06	873.1	0.40
3-庚炔	717.3	−0.07	782.4	0.09	2-辛炔	842.3	-0.04	920.7	0.18
4,4-二甲基-1-己炔	717.9	—	—	—	2,2,6,6-四甲基-3-庚炔	857.4	−0.03	861.6	0.11

续表

固定液	角鲨烷		液晶PBO①	
化合物 \ 保留指数	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$
1-壬炔	883.3	0.02	980.2	0.08
2,2,5-三甲基-5-乙基-3-庚炔	905.8	−0.06	896.0	0.26
4-壬炔	910.4	−0.04	967.7	0.20
2,2,5,6,6-五甲基-3-庚炔	914.4	0.01	908.8	0.41
3-壬炔	916.0	0.06	980.2	0.18
2,7-二甲基-4-辛炔	929.6	0.00	973.5	0.38
2-壬炔	941.0	−0.03	1019.1	0.20
2,2,5,5,6,6-六甲基-3-庚炔	956.4	0.04	938.7	0.47
1-癸炔	983.2	0.02	1080.8	0.18
2,2,7,7-四甲基-4-辛炔	1003.4	0.08	1024.5	0.52
4-癸炔	1007.3	−0.03	1067.5	0.41
5-癸炔	1008.2	−0.02	1064.9	0.48
3-癸炔	1014.3	−0.05	1079.0	0.36
2-癸炔	1041.1	−0.03	1120.6	0.34
1-十一炔	1083.3	0.02	1181.4	0.14
5-十一炔	1104.2	−0.01	1161.5	0.53
4-十一炔	1104.8	0.02	1164.7	0.48
3-十一炔	1113.5	−0.04	1178.3	0.44
2-十一炔	1140.9	−0.02	1220.7	0.35
1-十二炔	1183.3	0.02	1282.2	0.15
6-十二炔	1199.6	0.00	1258.2	0.58
5-十二炔	1201.1	0.02	1258.2	0.58
4-十二炔	1203.3	−0.03	1263.1	0.50
3-十二炔	1212.5	−0.05	1277.6	0.44
2-十二炔	1240.8	−0.03	1321.0	0.36
1-十三炔	1283.4	0.02	1382.9	0.15
6-十三炔	1295.6	0.01	1353.4	0.64
5-十三炔	1298.5	0.01	1355.8	0.62
4-十三炔	1301.5	−0.01	1361.6	0.53
3-十三炔	1311.9	−0.04	1377.1	0.44
2-十三炔	1340.6	−0.02	1421.2	0.38

①PBO是液晶4-正戊基乙酰苯-O-(4-正戊基氧代苯甲酰)肟。

表 13-49 C_6～C_{12}炔烃保留指数[47]

固定液：角鲨烷

化合物 \ I \ 柱温/℃	86	90	100	110	120	130
1-己炔	586.7	584.0	584.0	583.9	583.7	583.7
2-己炔	642.2	640.3	639.4	638.4	638.3	638.5
3-己炔	624.3	622.8	621.5	619.9	619.6	618.9
1-庚炔	686.3	684.3	684.4	684.2	684.5	684.4
2-庚炔	744.5	743.2	742.7	742.0	741.6	741.3
3-庚炔	718.1	717.1	716.3	715.8	715.0	714.3
1-辛炔	—	783.7	783.8	783.7	783.9	783.9
2-辛炔	—	842.4	842.0	841.4	840.9	840.5
3-辛炔	—	817.8	817.0	816.3	816.0	815.2
4-辛炔	—	811.3	810.7	810.3	809.7	809.2
1-壬炔	—	883.9	884.1	884.1	884.1	884.5
2-壬炔	—	941.2	940.8	940.6	940.2	939.7
3-壬炔	—	915.8	915.1	914.7	914.0	913.3
4-壬炔	—	910.5	910.1	909.7	909.2	908.7
1-癸炔	—	983.8	984.0	984.2	984.5	984.3
2-癸炔	—	1041.3	1041.0	1040.8	1040.4	1039.7
3-癸炔	—	1014.2	1013.8	1013.5	1012.8	1011.9
4-癸炔	—	1007.5	1007.3	1006.8	1006.5	1005.9
5-癸炔	—	1008.4	1008.1	1008.0	1007.7	1007.3
1-十一炔	—	—	—	1084.2	1084.4	1084.5
2-十一炔	—		—	1140.1	1140.1	1139.5
3-十一炔	—	—	—	1112.4	1112.0	1110.8
4-十一炔		—	—	1104.8	1104.4	1103.9
5-十一炔	—	—	—	1104.3	1104.0	1103.7
1-十二炔	—	—	—	1184.4	1184.6	1184.4
2-十二炔	—	—	—	1239.8	1239.8	1239.1
3-十二炔	—	—	—	1211.4	1211.0	1210.1
4-十二炔	—		—	1203.5	1202.9	1202.4
5-十二炔	—		—	1201.7	1201.4	1201.3
6-十二炔	—	—	—	1200.3	1200.0	1200.2

表 13-50　C_6～C_{14}炔烃保留指数[59]

柱温：80℃

固定液	角鲨烷		PBO①	
保留指数 / 化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
1-己炔	583.4	0.13	678.0	0.08
2-己炔	640.3	−0.42	718.9	0.05
3-己炔	623.1	−0.85	692.8	0.05
1-庚炔	683.6	0.12	779.1	0.06
2-庚炔	743.0	0.34	820.4	0.16
3-庚炔	717.3	−0.69	782.1	0.09
1-辛炔	783.0	0.16	879.4	0.06
2-辛炔	842.3	−0.35	920.7	0.18
3-辛炔	818.0	0.60	880.5	0.17
4-辛炔	811.3	0.46	872.1	0.11
1-壬炔	883.3	0.17	980.0	0.08
2-壬炔	941.0	−0.32	1020.2	0.20
3-壬炔	916.0	−0.60	980.0	0.18
4-壬炔	910.4	−0.36	968.8	0.20
1-癸炔	983.2	0.17	1080.8	0.18
2-癸炔	1041.1	−0.30	1120.6	0.34
3-癸炔	1014.3	−0.49	1079.0	0.36
4-癸炔	1007.3	−0.30	1067.5	0.41
5-癸炔	1008.2	−0.23	1064.9	0.48
1-十一炔	1083.3	0.15	1181.4	0.11
2-十一炔	1140.9	−0.24	1220.7	0.35
3-十一炔	1113.5	−0.44	1178.3	0.44
4-十一炔	1104.8	−0.18	1164.7	0.48
5-十一炔	1104.2	−0.14	1161.5	0.53
1-十二炔	1183.3	0.17	1282.2	0.15
2-十二炔	1240.8	−0.29	1321.0	0.36
3-十二炔	1212.5	−0.45	1277.6	0.44
4-十二炔	1203.3	−0.25	1263.1	0.50
5-十二炔	1201.1	−0.22	1258.2	0.58
6-十二炔	1199.6	0.00	1258.2	0.58
1-十三炔	1283.4	0.17	1382.9	0.15
2-十三炔	1340.6	−0.23	1421.2	0.38
3-十三炔	1311.9	−0.41	1377.1	0.44
4-十三炔	1301.5	−0.12	1361.6	0.53
5-十三炔	1298.5	−0.13	1355.8	0.62
6-十三炔	1295.6	0.09	1353.4	0.64
1-十四炔	1383.5	0.17	1483.4	0.14
2-十四炔	1440.6	−0.27	1521.6	0.36
3-十四炔	1411.1	−0.37	1476.6	0.46
4-十四炔	1400.4	−0.26	1460.6	0.55
5-十四炔	1396.4	0.11	1453.7	0.65
6-十四炔	1392.5	0.19	1450.3	0.67
7-十四炔	1390.5	0.28	1447.8	0.71

①PBO是4-正戊基苯乙酮-（O-4-正戊氧基苯甲酰肟）。

表 13-51　C_6～C_{14}炔烃保留指数[47]

固定液：聚苯醚

I 柱温/℃ / 化合物	90	110	130	150	170
1-壬炔	1002.7	1003.4	1003.8	—	—
2-壬炔	1066.5	1067.6	1068.5	—	—
3-壬炔	1032.9	1032.5	1032.4	—	—
4-壬炔	1021.8	1022.0	1023.2		—
1-癸炔	1102.7	1103.5	1104.3	—	—
2-癸炔	1167.5	1169.0	1171.2	—	—
3-癸炔	1131.8	1131.9	1132.0	—	—
4-癸炔	1120.2	1121.0	1121.2	—	—
5-癸炔	1120.6	1120.9	1121.5	—	—
1-十一炔	1201.5	1203.1	1204.5	1205.3	—
2-十一炔	1266.7	1267.6	1268.8	1269.6	—
3-十一炔	1230.0	1230.6	1231.2	1231.3	—
4-十一炔	1218.3	1219.0	1220.0	1221.2	—
5-十一炔	1217.9	1218.3	1219.2	1219.7	—
1-十二炔	—	1302.9	1304.2	1301.7	—
2-十二炔	—	1367.5	1368.4	1370.5	—
3-十二炔	—	1329.4	1329.7	1330.1	—
4-十二炔	—	1316.6	1317.6	1319.0	—
5-十二炔	—	1315.8	1317.0	1317.6	—
6-十二炔	—	1315.7	1316.6	1317.0	—
1-十三炔	—	1402.6	1403.3	1404.7	1405.4
2-十三炔	—	1467.6	1468.2	1470.3	1471.1
3-十三炔	—	1429.2	1429.3	1429.4	1429.7
4-十三炔	—	1415.3	1416.4	1417.2	1417.3
5-十三炔	—	1414.0	1414.9	1415.5	1416.3
6-十三炔	—	1412.2	1413.7	1415.2	1416.1
1-十四炔	—	1502.0	1503.1	1504.8	1505.8
2-十四炔	—	1568.3	1569.1	1570.3	1570.9
3-十四炔	—	1529.1	1529.2	1529.1	1529.1
4-十四炔	—	1515.2	1516.0	1516.5	1517.2
5-十四炔	—	1512.7	1512.9	1514.8	1514.9
6-十四炔	—	1509.3	1511.1	1512.3	1513.5
7-十四炔	—	1508.1	1509.3	1511.2	1512.3

表 13-52　C_{10}～C_{14}炔烃保留指数[47]

固定液：Apiezon L

化合物 \ 柱温/℃	110	130	150	170	190	化合物 \ 柱温/℃	110	130	150	170	190
1-癸炔	994.7	996.4	997.2	—	—	6-十二炔	—	1206.6	1206.0	1206.4	—
2-癸炔	1051.9	1052.2	1050.6	—	—	1-十三炔	—	—	1295.5	1297.2	1297.7
3-癸炔	1019.8	1019.3	1017.4	—	—	2-十三炔	—	—	1350.6	1351.0	1350.6
4-癸炔	1012.3	1012.0	1010.8	—	—	3-十三炔	—	—	1315.8	1315.0	1314.8
5-癸炔	1013.4	1013.3	1012.9	—	—	4-十三炔	—	—	1307.1	1306.9	1306.6
1-十一炔	1094.6	1095.5	1095.2	1096.1	—	5-十三炔	—	—	1305.5	1305.7	1305.9
2-十一炔	1151.4	1151.8	1150.8	1150.0	—	6-十三炔	—	—	1302.6	1303.5	1303.9
3-十一炔	1118.8	1118.6	1116.9	1116.1	—	1-十四炔	—	—	1395.7	1397.4	1398.3
4-十一炔	1110.5	1110.6	1109.9	1109.9	—	2-十四炔	—	—	1450.7	1451.2	1451.2
5-十一炔	1109.7	1110.1	1109.2	1109.1	—	3-十四炔	—	—	1414.9	1414.4	1414.5
1-十二炔	—	1194.6	1195.2	1197.2	—	4-十四炔	—	—	1406.9	1406.5	1406.7
2-十二炔	—	1251.0	1250.5	1250.4	—	5-十四炔	—	—	1403.9	1404.3	1405.1
3-十二炔	—	1218.0	1216.4	1215.5	—	6-十四炔	—	—	1401.1	1041.2	1402.0
4-十二炔	—	1208.4	1208.6	1208.5	—	7-十四炔	—	—	1400.2	1400.3	1400.7
5-十二炔	—	1208.4	1207.4	1207.6	—						

表 13-53　C_{14}烯烃与炔烃保留指数[134]

固定液：PEG-20M　柱温：80 ℃

化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
1-十三烯	1344.1	1.0	反-5-十四烯	1427.1	1.0	1-十四炔	1626.2	1.1
1-十四烯	1443.6	1.0	顺-5-十四烯	1427.1	1.8	2-十四炔	1651.8	3.0
反-2-十四烯	1458.6	0.6	反-6-十四烯	1424.8	1.0	3-十四炔	1596.0	3.2
顺-2-十四烯	1467.8	1.8	顺-6-十四烯	1422.6	1.8	4-十四炔	1576.0	2.9
反-3-十四烯	1438.4	0.4	反-7-十四烯	1423.5	1.2	5-十四炔	1568.6	3.0
顺-3-十四烯	1440.5	1.3	顺-7-十四烯	1421.1	1.6	6-十四炔	1564.3	2.9
反-4-十四烯	1429.3	0.8	3-十三炔	1498.5	3.2	7-十四炔	1562.3	3.1
顺-4-十四烯	1432.9	1.8						

第三节　环烷与环烯烃的保留指数

表 13-54　烃基环丙烷保留指数[25]

固定液：角鲨烷

化合物 \ 柱温/℃	室温	60	80	100	120
甲基环丙烷	414.5	—	—	—	—
亚甲基环丙烷	432.5	—	—	—	—
1-甲基环丙烯	426.3	—	—	—	—
乙基环丙烷	508.3	—	—	—	—
1-乙烯基环丙烷	515.6	—	—	—	—
1,1-二甲基环丙烷	458.8	—	—	—	—
反-1,2-二甲基环丙烷	481.0	—	—	—	—
顺-1,2-二甲基环丙烷	513.1	—	—	—	—
正丙基环丙烷	608.9	—	614.8	—	—
3-丙烯基环丙烷	592.8	—	597.6	—	—
反-1-丙烯基环丙烷	638.6	—	641.7	—	—
顺-1-丙烯基环丙烷	643.2	—	646.8	—	—

续表

化合物 \ 柱温/℃	室温	60	80	100	120
1-(1-甲基)乙基环丙烷	569.9	—	—	—	—
1-甲基-1-乙基环丙烷	567.0		—	—	—
1-甲基-反-2-乙基环丙烷	568.0	—	—	—	—
1-甲基-顺-2-乙基环丙烷	603.0	—	—	—	—
1-甲基-反-2-(1-乙烯基)环丙烷	580.6	—	584.8	—	—
1-甲基-顺-2-(1-乙烯基)环丙烷	605.4	—	609.8	—	—
1,1,2-三甲基环丙烷	548.5	549.9	—	—	—
二环丙基烷	640.2	—	646.2	—	—
正丁基环丙烷	—	712.5	713.7	—	—
3-丁烯基环丙烷	—	—	694.2	—	—
反-2-丁烯基环丙烷	—	—	715.4	—	—
顺-2-丁烯基环丙烷	—	721.4	723.6	725.0	—
反-1-丁烯基环丙烷	—	731.4	731.6	731.0	—
顺-1-丁烯基环丙烷	—	728.4	728.8	731.0	—
(2-甲基)丙基环丙烷	—	680.6	—	—	—
1-甲基-1-丙基环丙烷		662.8	—	—	—
(1,1-二甲基)乙基环丙烷	—	627.4	—	—	—
1-甲基-1-(1-甲基)乙基环己烷	—	646.0	—	—	—
1-甲基-反-2-丙基环丙烷	—	668.0	—	—	—
1-甲基-反-2-(1-反-丙烯基)环丙烷	—	703.0	781.9	702.0	—
1-甲基-反-2-(1-顺-丙烯基)环丙烷	698.9	697.5	697.9	—	—
1-甲基-反-2-异丙基环丙烷	624.8	—	—	—	—
1,2-二甲基-反-2-乙基环丙烷	653.6	—	—	—	—
1-甲基-顺-2-丙基环丙烷	702.2	—	—	—	—
1-甲基-顺-2-(2-丙烯基)环丙烷	687.9	690.5	691.6	—	—
1-甲基-顺-2-(1-反-丙烯基)环丙烷	720.1	719.7	720.4	—	—
1-甲基-顺-2-(1-顺-丙烯基)环丙烷	723.7	723.9	725.5	—	—
1-甲基-顺-2-异丙基环丙烷	658.4	—	—	—	—
1,2-二甲基-顺-2-乙基环丙烷	654.7	—	—	—	—
反-1,2-二乙基环丙烷	662.8	—	—	—	—
1-(1-乙烯基)-反-2-乙基环丙烷	668.4	669.6	670.8	—	—
顺-1,2-二乙基环丙烷	694.8	—	—	—	—
1-(1-乙烯基)-顺-2-乙基环丙烷	694.3	696.3	697.6	—	—
1,1-二甲基-2-乙基环丙烷	632.8	—	—	—	—
1,1,2,2-四甲基环丙烷	621.2	—	—	—	—
1,1-二乙基环丙烷	672.8	—	—	—	—
(2,3-亚甲基)丙基环丙烷	—	732.0	—	—	—
正戊基环丙烷	812.2	813.4	—	—	—
(2-甲基)丁基环丙烷	791.0	—	—	—	—
1,1-二甲基-2-丙基环丙烷	727.4	—	—	—	—
(3,4-亚甲基)丁基环丙烷	—	826.8	—	—	—
(1-甲基-2,3-亚甲基)丙基环丙烷	—	—	795.3	797.8	—
1-甲基-1-(2,3-亚甲基)丙基环丙烷	—	—	778.0	781.8	—
(反-2,3-亚甲基)丁基环丙烷	—	—	783.7	786.3	—
(顺-2,3-亚甲基)丁基环丙烷	—	819.1	822.9	825.3	
(反-1,2-亚甲基)丁基环丙烷	—	790.4	792.7	794.7	—
(顺-1,2-亚甲基)丁基环丙烷	—	802.3	810.3	813.1	—
正己基环丙烷	—	912.4	912.7	914.6	916.6
5-己烯基环丙烷	—	893.7	895.2	897.4	899.5

续表

I 柱温 ℃ 化合物	室温	60	80	00	120
反-1-己烯基环丙烷		—	911.8	913.2	914.6
顺 1-己烯基环丙烷	—	·	915.4	917.7	920.1
顺 1 己烯基环丙烷	—	—	922.6	923.9	—
反-1-己烯基环丙烷		-	928.7	929.3	-
反 1-反-4-己二烯基环丙烷	—	—	936.5	936.8	—
顺-1-反 4 己二烯基环丙烷	--	—	929.4	930.1	—
1-甲基 1 戊基环丙烷	·	853.1	—	—	
1 甲基 1 (3 亚甲基)丁基环丙烷	—	—	835.4	837.6	—
1-乙基 1 丁基环丙烷	—	—	855.3	—	—
1,1-二丙基环丙烷	—	—	852.6		·
1,1-二甲基-2-丁基环丙烷	—	822.6	—	—	—
1,1 二甲基-2-(2 甲基)-1-丙烯基 环丙烷	—	—	819.4	820.1	·
1,1,2 三甲基 2-丙基环丙烷		805.5	814.5	—	—
1-甲基-反-2-戊基环丙烷	—	864.2	—	865.9	—
1-甲基 反-2-(4 戊烯基)环丙烷			848.9	850.4	851.1
1 甲基-反-2-(反 3-戊烯基)环丙烷	—	—	860.5	861.8	862.4
1 甲基-反-2-(顺 3 戊烯基)环丙烷	—	—	867.5	870.2	871.0
1 甲基-反-2-(反 2,4 戊二烯基)环丙烷	—	—	884.2	885.4	—
1-甲基-反-2-(顺 2,4 戊二烯基)环丙烷	—	—	879.9	881.4	—
1 甲基-顺-2-戊基环丙烷	—	899.65	900.27	902.10	903.51
1-甲基 顺 2 (4-戊烯基)环丙烷			882.1	884.3	886.7
1 甲基-顺 2-(反-3-戊烯基)环丙烷	—	—	897.5	900.0	900.0
1 乙基-反-2-丁基环丙烷	—	857.5	—	860.2	—
1-(1-乙基)-反 2-丁基环丙烷	—	—	862.5	866.5	—
1-(1 乙烯基) 反-2-(反 2 丁烯基)环丙烷		—	866.2	867.2	—
1-乙基 顺 2-丁基环丙烷	·	886.8	—	890.5	—
1-(1 乙烯基) 顺-2-丁基环丙烷	·	—	886.3	889.0	—
1 (1-乙烯基)-顺-2-(反-2-丁烯基)环丙烷	—	—	891.2	892.1	—
反-1,2-二丙基环丙烷	—	—	—	857.0	—
顺 1,2 二丙基环丙烷		885.0	—	888.9	—
正庚基环丙烷	—	1011.90	1013.53	1015.27	1016.94
(5-甲基)己基环丙烷	—	975.50	977.42	979.46	981.43
(4-甲基)己基环丙烷	—	980.53	982.74	985.11	987.43
(3 甲基)己基环丙烷	·	973.15	975.23	977.35	978.96
(2 甲基)己基环丙烷		972.14	974.18	976.28	978.96
(1 甲基)己基环丙烷	—	964.29	966.79	969.39	971.96
1 甲基-1-己基环丙烷	—	954.49	956.29	958.04	959.91
1,1 二甲基 2 戊基环丙烷	—	919.6	920.71	922.28	923.38
1 甲基-反-2 己基环丙烷	—	963.33	964.41	965.42	966.40
1 甲基-反-2-(4-甲基)戊基环丙烷	—	926.53	927.46	929.28	930.01
1 甲基-反-2-(3-甲基)戊基环丙烷	—	934.40	935.66	937.68	938.98
1 甲基-反-2 (2-甲基)戊基环丙烷[1]	--	924.99	925.98	928.02	930.01
		927.61	928.62	926.60	930.01
1-甲基 反 2-(1-甲基)戊基环丙烷[1]	—	909.55	910.30	913.17	911.56
		914.81	916.07	918.25	919.42
1,2 二甲基 反-2-戊基环丙烷	—	937.05	938.57	940.90	942.52
1-甲基 反 2-戊基 顺 3 甲基环丙烷	-	943.68	944.12	945.93	946.37
1 甲基 顺 2 戊基-反-3-甲基环丙烷	—	939.00	939.43	940.21	940.45
1 甲基-顺 2 己基环丙烷	—	997.6	999.00	1001.0	1002.4

续表

化合物 \ 柱温/℃ I	室温	60	80	100	120
1-甲基-顺-2-(4-甲基)戊基环丙烷	—	960.8	962.38	964.86	966.57
1-甲基-顺-2-(3-甲基)戊基环丙烷	—	966.1	968.05	970.88	972.75
1-甲基-顺-2-(2-甲基)戊基环丙烷[1]	—	960.8	962.38	964.86	966.57
		942.7	944.43	947.14	949.03
1-甲基-顺-2-(1-甲基)戊基环丙烷	—	947.3	948.66	950.96	952.54
1,2-二甲基-顺-2-戊基环丙烷	—	931.4	932.78	934.81	936.23
1-甲基-顺-2-戊基-顺-3-甲基环丙烷		1001.3	1003.6	1006.4	1008.7
1-乙基-反-2-戊基环丙烷	—	954.90	956.09	958.26	—
1-乙基-顺-2-戊基环丙烷	—	985.1	986.42	988.57	989.98
(5,6-亚甲基己基)环丙烷	—	—	1026.7	1030.2	1033.3
(反-4,5-亚甲基己基)环丙烷	—	—	—	918.2	983.4
(顺-4,5-亚甲基己基)环丙烷			959.00	1015.3	1018.8
(反-1,2-亚甲基己基)环丙烷			987.1	990.0	—
(顺-1,2-亚甲基己基)环丙烷	—	—	998.5	1002.1	
1-甲基-反-2-(反-3,4-亚甲基戊基)环丙烷	—	—	931.2	933.6	—
1-甲基-顺-2-(反-3,4-亚甲基戊基)环丙烷[1]	—	—	965.1	968.3	—
			966.2	968.9	
1-甲基-顺-2-(顺-3,4-亚甲基戊基)环丙烷[1]			1003.5	—	—
			1003.8		
1-甲基-反-2-(反-2,3-亚甲基戊基)环丙烷		—	925.9	—	—
(反-4,5-亚甲基)-反-1-己烯基环丙烷	—	—	996.0	997.3	
(反-4,5-亚甲基)-顺-1-己烯基环丙烷	—		995.5	997.3	—
(反-1,2-亚甲基)-反-4-己烯基环丙烷	—	—	987.5	989.5	—
(顺-1,2-亚甲基)-反-4-己烯基环丙烷	—	—	1005.3	1008.4	—
1-甲基-反-2-(反-2,3-亚甲基)-4-戊烯基环丙烷	—	—	938.8	939.9	—
1-甲基-反-2-(顺-2,3-亚甲基)-4-戊烯基环丙烷	—	—	955.8	958.0	—
正辛基环丙烷	—	—	—	1115.7	
1-乙基-反-2-己基环丙烷	—	—	—	1056.6	1057.9
1-乙基-顺-2-己基环丙烷	—	—	—	1087.2	1088.8
7-辛烯基环丙烷	—	—	1197.0	—	
反-3-辛烯基环丙烷	—	—	—	1099.6	1101.2
反-2-辛烯基环丙烷	—	—	—	1098.5	1101.2
反-4,7-辛二烯基环丙烷	—	—	—	1083.3	1085.9
1-(2-丙烯基)-反-2-戊基环丙烷	—	—		1038.0	1039.7
1-(2-丙烯基)-反-2-(4-戊烯基)环丙烷	—			1022.2	1025.1
正壬基环丙烷	—	—	—		1215.5
(7,8-亚甲基)辛基环丙烷	—	—	—	1231.2	
(反-4,5-亚甲基)辛基环丙烷	—	—	—	1168.1	1171.2
(反-2,3-亚甲基)辛基环丙烷	—	—	—	1166.8	1170.1
(反-4,5-亚甲基)-7-辛烯基环丙烷	—	—	—	1162.0	—
(反-2,3-亚甲基)-7-辛烯基环丙烷	—	—	—	1156.9	—
正癸基环丙烷	—	—	—		1315.4
1-乙基-2-甲基-反-2-庚基环丙烷	—			1208.2	—
1-乙基-2-甲基-顺-2-庚基环丙烷		—	—	1218.6	—
1-己基-2-甲基-反-2-丙基环丙烷			—	1204.4	—
1-己基-2-甲基-顺-2-丙基环丙烷	—	—	—	1214.4	—
1-丙基-2-甲基-反-2-己基环丙烷	—	—	—	1198.6	—
1-丙基-2-甲基-顺-2-己基环丙烷	—		—	1211.6	—
1-戊基-2-甲基-反-2-丁基环丙烷	—	—	—	1194.4	—
1-戊基-2-甲基-顺-2-丁基环丙烷	—	—	—	1206.5	—
反-2,3-亚甲基壬基环丙烷				1264.8	—

[1] 非对映立体异构体。

表 13-55　烷基环戊烷保留指数[illegible]

固定液	SE-30	角鲨烷		十六烷	三十六烷	正十六烷+Fluolubrol
I 化合物 \ 柱温/℃	130	25	70	25	78.5	25
环戊烷	572	563	570	555	573	551
甲基环戊烷	634	625	631	617	634	617
1，1-二甲基环戊烷	683	670	677	663	679	661
1-顺 3-二甲基环戊烷	694	679	686	674	689	672
1-反 3-二甲基环戊烷	698	683	690	678	—	676
1-反 2-二甲基环戊烷	702	686	—	680	696	678
1-顺 2-二甲基环戊烷	734	716	725	708	727	705
乙基环戊烷	749	729	738	722	741	721
1，1，3-三甲基环戊烷	740	719	—	715	769	716
1-反 2-顺（1）4-三甲基环戊烷	759	738	—	733	—	736
1-反 2-顺（1）3-三甲基环戊烷	766	744	—	738	—	742
1，1，2-三甲基环戊烷	779	757	—	749	—	753
1-顺 2-反（1）4-三甲基环戊烷	791	768	—	—	—	765
1 顺 2 反（1）3-三甲基环戊烷	798	773	—	—	—	767
反-1-甲基-3-乙基环戊烷	810	785	—	—	—	783
反-1-甲基 2-乙基环戊烷	811	786		—	—	783
1-甲基-1-乙基环戊烷	814	788	—	—	801	783
1 顺 2 顺（1）3 三甲基环戊烷	821	794	—	—	—	789
顺-1-甲基-3-乙基环戊烷	808	783	—	—	—	781
异戊基环戊烷	835	806	—	—	823	798
戊基环戊烷	851	—	834	—	838	819
1 顺 2-顺（1）4 三甲基环戊烷	797	—	—	—	—	770
顺-1-甲基-2-乙基环戊烷	846	—	—	—	—	807

表 13-56　烷基环戊烷与环己烷的保留指数[136]

（固定液：角鲨烷　　柱温：25℃）

化合物	*I*	化合物	*I*
环戊烷	562.4	乙基环戊烷	729.3
甲基环戊烷	624.6	1,1-二甲基环己烷	779.8
1,1-二甲基环戊烷	669.3	1,反-4-二甲基环己烷	780.0
1,反-3-二甲基环戊烷	682.1	1-甲基-2 反-乙基环戊烷	788.4
1,反-2-二甲基环戊烷	685.3	异丙基环戊烷	806.1
环己烷	658.3	乙基环己烷	827.5
1,1,3-三甲基环戊烷	718.9	正丙基环戊烷	825.6
甲基环己烷	719.9	1,1,3 三甲基环戊烷	833.8

表 13-57　烷基环己烷保留指数（一）[2]

柱温：130℃

I 化合物 \ 固定液	Apiezon L	SE 30	*I* 化合物 \ 固定液	Apiezon L	SE 30
环己烷	696	676	反 1,3,5-三甲基环己烷	883	840
甲基环己烷	765	739	顺-1,3,5-三甲基环己烷	900	870
乙基环己烷	876	842	反-1,2,4-三甲基环己烷	893	868
1,1 二甲基环己烷	830	-	顺 1,2,4-三甲基环己烷	921	895
反 1,2-二甲基环己烷	847	817	反-1,2,3-三甲基环己烷	918	954
顺-1,2-二甲基环己烷	879	850	顺-1,2,3 三甲基环己烷	950	982
反 1,3-二甲基环己烷	802	798	反-1-甲基-4-异丙基环己烷	1 002	997
顺-1,3-二甲基环己烷	848	823	顺 1-甲基-4-异丙基环己烷	1 004	1 000
反-1,4-二甲基环己烷	826	796	正丁基环己烷	1 064	1 061
顺-1,4-二甲基环己烷	848	820	异丁基环己烷	1 018	1 005
正丙基环己烷	972	914	1,3-二乙基环己烷	1 035	1 017
异丙基环己烷	968	934			

表 13-58　烷基环己烷保留指数（二）[15]

固定液	SE-30		角鲨烷		三十六烷	正十六烷—Fluolubrol
I　温度 /°C 化合物	80	130	25	70	78.5	25
环己烷	667	676	662	668	672	645
甲基环己烷	727	739	720	730	735	711
反 1,4 二甲基环己烷	781	796	780	789	—	779
1,1-二甲基环己烷	784	—	780	792	796	776
顺-1,3-二甲基环己烷	783	798	779	789	795	779
反-1,2-二甲基环己烷	802	817	793	807	—	789
顺 1,4 二甲基环己烷	804	820	798	810	—	790
反-1,3-二甲基环己烷	806	823	799	810	—	790
顺-1,2-二甲基环己烷	831	850	—	836	—	811
乙基环己烷	825	842	828	839	845	818
反-1,3,5-三甲基环己烷	—	840	—	—	—	—
顺-1,3,5-三甲基环己烷	—	870	—	—	—	—
反-1,2,3-三甲基环己烷	—	954	—	—	—	—
顺-1,2,3-三甲基环己烷	—	982	—	—	—	—
反 1,2,4-三甲基环己烷	—	868	—	—	—	—
顺-1,2,4-三甲基环己烷	—	895	—	—	—	—
异丙基环己烷	—	934	—	923	—	—
正丙基环己烷	—	944	—	931	—	—
反-1-甲基-4-异丙基环己烷	—	997	—	—	—	—
顺-1,2,4,5-四甲基环己烷	—	1036	—	—	—	—
顺-1-甲基-4-异丙基环己烷	—	1000	—	—	—	—
反-1,2,4,5-四甲基环己烷	—	1054	—	—	—	—
异丁基环己烷	—	1005	—	983	—	—
1,4-二乙基环己烷	—	1072	—	—	—	—
		1105				
1,3-二乙基环己烷	—	1017	—	—	—	—
正丁基环己烷	—	1061	—	1029	—	—

表 13-59　C_6～C_{12}环烷保留指数[53]

柱温：100℃

固　定　液	角鲨烷		Apeizon L		聚苯乙醚		聚乙二醇 4000	
保留指数 化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
甲基环戊烷	635.8	2.30	—	—	678.1	3.41	—	—
乙基环戊烷	743.2	2.09	—	—	788.7	4.48	816.7	3.95
正丙基环戊烷	839.4	2.00	851.6	2.67	882.7	3.57	911.6	4.05
正丁基环戊烷	937.2	2.09	950.2	2.95	979.7	3.50	1008.9	4.03
正戊基环戊烷	1036.5	1.84	1049.9	2.97	1077.7	3.44	1107.3	4.10
正己基环戊烷	1135.0	2.32	1149.8	2.95	1177.5	3.37	1207.0	4.30
环己烷	674.0	2.52	691.9	3.86	727.9	4.00	766.3	4.72
甲基环己烷	738.3	2.67	754.2	3.99	782.8	4.63	813.9	4.80
乙基环己烷	847.5	2.71	865.2	3.75	892.0	3.88		
正丙基环己烷	939.8	2.71	956.4	3.90	984.0	4.00	1018.6	5.20
正丁基环己烷	1037.1	2.74	1053.0	4.06	1081.8	4.53	1115.5	5.03
正己基环己烷	1236.2	2.62	1249.0	4.63	1280.3	4.45	1312.0	5.10
异丙基环己烷	932.9	3.33	950.6	3.68	980.9	4.78	—	—
异丁基环己烷	991.6	2.76	1004.3	4.07	1028.4	4.26	1057.8	5.00
仲丁基环己烷	1032.3	3.05	1046.3	5.86	1083.4	5.47	1119.8	5.92

表 13-60 烷基环戊烷与烷基环己烷的保留指数[104]

固定液：OV-1　　柱温：100℃

化合物	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	化合物	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$
环戊烷	574.5	0.170	壬基环戊烷	1438.0	0.263
甲基环戊烷	638.1	0.199	癸基环戊烷	1536.3	0.283
乙基环戊烷	743.4	0.226	十一基环戊烷	1636.4	0.288
丙基环戊烷	839.2	0.232	环己烷	673.6	0.248
丁基环戊烷	938.3	0.241	甲基环己烷	734.6	0.268
戊基环戊烷	1037.6	0.253	乙基环己烷	842.8	0.290
己基环戊烷	1137.9	0.249	丙基环己烷	936.4	0.280
辛基环戊烷	1038.0	0.262	丁基环己烷	1036.0	—

表 13-61 链烯基环烷保留指数[104]

固定液：OV-1　　柱温：100℃

化合物	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	化合物	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$
亚甲基环戊烷	578.5	0.193	9-壬烯基环戊烷	1426.5	0.283
乙烯基环戊烷	731.3	0.234	10-癸烯基环戊烷	1524.7	0.305
烯丙基环戊烷	828.8	0.242	11 十一烯基环戊烷	1625.3	0.305
4-丁烯基环戊烷	927.7	0.254	亚甲基环己烷	750.8	0.271
5-戊烯基环戊烷	1026.5	0.263	乙烯基环己烷	829.8	0.311
6-己烯基环戊烷	1125.9	0.274	烯丙基环己烷	925.8	0.323
7-庚烯基环戊烷	1224.7	0.270	4-丁烯基环己烷	1024.5	0.325
8-辛烯基环戊烷	1325.9	0.286	5-戊烯基环己烷	1123.9	0.308

表 13-62 二甲基环烷保留指数[1]

固定液：角鲨烷　　柱温：70℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
1,1-二甲基环戊烷	677	反-1,4-二甲基环己烷	789	1,1-二甲基环辛烷	1046
反-1,2-二甲基环戊烷	693	顺-1,4-二甲基环己烷	810	反-1,2-二甲基环辛烷	1069
顺-1,2-二甲基环戊烷	725	乙基环己烷	839	顺-1,2-二甲基环辛烷	1075
反-1,3-二甲基环戊烷	690	1,1-二甲基环庚烷	916.5	反-1,3-二甲基环辛烷	1046
顺-1,3-二甲基环戊烷	686	反-1,2-二甲基环庚烷	941	顺-1,3-二甲基环辛烷	1044
乙基环戊烷	738	顺-1,2-二甲基环庚烷	961	反-1,4-二甲基环辛烷	1052
1,1-二甲基环己烷	792	反-1,3-二甲基环庚烷	927	顺-1,4-二甲基环辛烷	1054
反-1,2-二甲基环己烷	807	顺-1,3-二甲基环庚烷	920.5	反-1,5-二甲基环辛烷	1055
顺-1,2-二甲基环己烷	836	反-1,4-二甲基环庚烷	922	顺-1,5-二甲基环辛烷	1049
反-1,3-二甲基环己烷	810	顺-1,4-二甲基环庚烷	926	乙基环辛烷	1092
顺-1,3-二甲基环己烷	789	乙基环庚烷	969		

表 13-63 C_5～C_8 环烷保留指数[1]

固定液：OV-101

柱温/℃ \ 保留指数 \ 化合物	40	50	60	70	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
	I				
环戊烷	565.6	566.1	569.4	569.9	1.62
甲基环戊烷	626.6	628.4	630.1	631.5	1.64
环己烷	658.7	660.9	663.2	665.5	2.27
1,1-二甲基环戊烷	671.7	673.6	675.4	676.9	1.74
1,顺 3-二甲基环戊烷	681.7	683.4	685.1	686.8	1.70

续表

柱温/℃ 保留指数 化合物	40	50	60	70	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
	I				
1,反-3-二甲基环戊烷	684.5	686.2	687.9	689.7	1.73
1,反-2-二甲基环戊烷	687.1	688.8	690.5	692.2	1.70
1,顺-2-二甲基环戊烷	719.0	721.4	723.2	725.2	2.04
甲基环己烷	719.0	721.4	723.8	726.2	2.40
1,1,3-三甲基环戊烷	721.8	723.7	725.7	727.5	1.90
乙基环戊烷	729.9	731.9	734.1	735.6	1.93
1,反-2,顺-4-三甲基环戊烷	738.4	740.1	741.8	743.3	1.63
1,反-2,顺-5-三甲基环戊烷	745.3	747.1	748.9	750.9	1.86
1,1,2 三甲基环戊烷	758.9	761.4	763.8	766.3	2.46
1,顺 3 二甲基环己烷	773.3	775.5	777.9	780.2	2.31
1,反-4-二甲基环己烷	774.9	777.2	779.6	782.0	2.37
1,1-二甲基环己烷	779.8	782.6	785.4	788.5	2.89
1,反-乙基,3-甲基环戊烷	784.0	785.9	787.6	789.8	1.93
1,反-乙基,2-甲基环戊烷	787.1	789.1	791.1	793.1	2.00
1,反-2-二甲基环己烷	791.8	793.9	796.2	798.4	2.21
苯	652.1	654.1	656.0	658.3	2.06
甲苯	754.0	756.1	758.0	759.8	1.93

表 13-64　C_5～C_{13}环烷保留指数[4]

固定液	角鲨烷		Emulphor O		固定液	角鲨烷		Emulphor O	
I 柱温/℃ 化合物	80	120	80	120	I 柱温/℃ 化合物	80	120	80	120
环戊烷	568	578	615	—	甲基环庚烷	869	—	914	933
环己烷	668	675	716	—	甲基环辛烷	—	999	—	1066
环庚烷	804	816	860	882	甲基环壬烷	—	1106	—	1180
环辛烷	925	940	990	1016	甲基环癸烷	—	1202	—	1280
环壬烷	—	1049	—	1133	甲基环十一烷	—	1288	—	1370
环癸烷	—	1147	—	1235	甲基环十二烷	—	1379	—	1463
环十一烷	—	1235	—	1327	乙基环戊烷	738	—	—	—
环十二烷	—	1325	—	1417	乙基环己烷	839	—	875	—
甲基环戊烷	635	—	667	—	乙基环庚烷	969	—	—	—
甲基环己烷	733	—	767	782	乙基环辛烷	1092	—	—	—

表 13-65　C_6～C_{10}环烷保留指数[4]

柱温：70℃

I 固定液 化合物	角鲨烷	Emulphor O	I 固定液 化合物	角鲨烷	Emulphor O
环己烷	668	710	反-1,4-二甲基环己烷	789	814
甲基环己烷	730	764	顺-1,4-二甲基环己烷	810	844
乙基环己烷	839	875	1,1-二甲基环己烷	792	815
异丙基环己烷	923	960	环辛烷	920	989
正丙基环己烷	931	966	甲基环庚烷	864	909
异丁基环己烷	983	1010	乙基环己烷	839	875
正丁基环己烷	1029	1063	丙基环戊烷	834	865
反-1,2-二甲基环己烷	807	837	丁基环丁烷	—	—
顺-1,2-二甲基环己烷	836	875	戊基环丙烷	813	858
反-1,3-二甲基环己烷	810	844	双环辛烷-[5.1.0]	885	968
顺-1,3-二甲基环己烷	789	816	双环辛烷-[3.3.0]	870	936

表 13-66 C_8、C_9环烷保留指数[28]

固定相	石墨化炭黑	角鲨烷		Ucon50 HB 280X
I 柱温/℃ 化合物	250	78.8	85.0	78.5
三乙基环己烷				
1-*rac*-2-反-4-顺三乙基环己烷	1026.3	1162.9	—	1185.5
1-*rac*-2-顺-4-顺三乙基环己烷	1067.3	1173.1	—	1195.4
1-*rac*-2-顺-4-反三乙基环己烷	1095.2	1169.7	—	1190.6
1-*rac*-2-反-4-反三乙基环己烷	1117.3	1164.6	—	1184.2
三乙烯基环己烷				
1-*rac*-2-反-4-顺三乙烯基环己烷	961.2	—	1097.5	1217.1
1-*rac*-2-顺-4-反三乙烯基环己烷	987.1	—	1113.9	1232.2
1-*rac*-2-顺-4-顺三乙烯基环己烷	1025.0	—	1113.9	1234.8
1-*rac*-2-反-4-反三乙烯基环己烷	1081.1	—	1093.3	1209.4
1，2-二乙基环辛烷				
顺-1，2-二乙基环辛烷	1012.8	1232.9	—	1272.8
反-1，2-二乙基环辛烷	1049.2	1226.6	—	1265.3

表 13-67 环己基烷烃保留指数[4]

柱温：200℃

I 固定液 化合物	Apiezon L	聚苯醚 OS-138	I 固定液 化合物	Apiezon L	聚苯醚 OS-138
1-环己基庚烷	1385	1423	6-环己基十一烷	1666	1696
2-环己基庚烷	1362	1400	2-环己基十二烷	1859	1899
3-环己基庚烷	1335	1373	3-环己基十二烷	1822	1859
4-环己基庚烷	1321	1356	4-环己基十二烷	1787	1819
1-环己基癸烷	1686	1735	5-环己基十二烷	1768	1801
2-环己基癸烷	1659	1702	6-环己基十二烷	1760	1789
3-环己基癸烷	1625	1661	2-环己基十三烷	1959	2000
4-环己基癸烷	1592	1624	3-环己基十三烷	1921	1960
5-环己基癸烷	1577	1608	4-环己基十三烷	1886	1919
2-环己基十一烷	1760	1801	5-环己基十三烷	1866	1897
3-环己基十一烷	1723	1759	6-环己基十三烷	1856	1886
4-环己基十一烷	1689	1720	7-环己基十三烷	1854	1883
5-环己基十一烷	1671	1702			

表 13-68 二环 [*n*、*m*、*o*] 烷烃保留指数[41]

固定相	角鲨烷		Ucon50 HB 280X		石墨化碳黑
柱温/℃	90		90		220
保留指数 化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I
顺二环 [3. 1. 0] 己烷	678.3	2.4	740.6	3.0	528
顺二环 [4. 1. 0] 庚烷	797.4	2.6	870.0	3.4	577
顺二环 [3. 2. 0] 庚烷	787.4	2.8	837.6	3.8	565
顺二环 [5. 1. 0] 辛烷	888.1	3.9	929.2	4.9	673
顺二环 [4. 2. 0] 辛烷	879.9	3.5	931.1	4.3	655
顺二环 [3. 3. 0] 辛烷	870.1	3.0	922.2	4.3	658
顺二环 [6. 1. 0] 壬烷	995.7	4.4	1060.2	5.7	768
顺二环 [5. 2. 0] 壬烷	990.1	4.0	1043.3	5.5	769

续表

固定相	角鲨烷		Ucon50 HB 280X		石墨化碳黑
柱温/℃	90		90		220
保留指数 / 化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I
顺二环[4.3.0]壬烷	991.0	3.8	1046.0	5.6	750
反二环[4.3.0]壬烷	961.1	3.5	1007.1	5.6	800
顺二环[7.1.0]癸烷	1110.0	4.8	1187.0	6.4	861
反二环[7.1.0]癸烷	1090.0	4.7	1161.8	6.4	872
顺二环[6.2.0]癸烷	1097.0	4.4	1154.4	6.9	866
顺二环[5.3.0]癸烷	1095.4	4.2	1150.3	6.9	867
顺二环[4.4.0]癸烷	1100.5	4.3	1159.1	6.9	842
反二环[4.4.0]癸烷	1064.0	4.4	1109.2	6.1	883
顺二环[8.1.0]十一烷	1215.7	5.1	1292.3	7.0	957
反二环[8.1.0]十一烷	1193.9	5.1	1268.9	7.0	968
顺二环[5.4.0]十一烷	1226.2	4.4	1277.6	7.8	942
反二环[5.4.0]十一烷	1205.9	4.6	1253.0	7.4	968
顺二环[9.1.0]十二烷	1309.7	5.1	1385.7	8.1	1082
反二环[9.1.0]十二烷	1288.0	4.9	1355.0	7.6	1100
顺二环[6.4.0]十二烷	1299.0	4.5	1350.1	7.5	1057
顺二环[5.5.0]十二烷	1311.5	4.2	1369.0	7.4	1077
反二环[5.5.0]十二烷	1298.7	4.1	1350.5	7.2	1093
顺二环[10.1.0]十三烷	1403.5	5.2	1472.8	8.5	1197
反二环[10.1.0]十三烷	1381.9	5.1	1450.0	8.2	1207

表 13-69 双环烃保留指数[81]

固定液：SE-30

I 柱温/℃ / 化合物	80	130	150	I 柱温/℃ / 化合物	80	130	150
反四氢化茚	955	980	—	双环戊二烯	1014	1043	—
顺四氢化茚	987	1012	1022	反十氢化萘	1049	1078	1090
双环[4.3.0]壬 3,6(1)-二烯	1038	1059	1068	顺十氢化萘	1087	1120	1132

表 13-70 烷基环戊烯保留指数[114]

固定液：角鲨烷 柱温：64℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
1-甲基-1-环戊烯	646.4	1-正庚基-1-环戊烯	1228.6	3-正丁基-1-环戊烯	911.1
1-乙基-1-环戊烯	748.2	1-正辛基-1-环戊烯	1328.4	3-正戊基-1-环戊烯	1009.7
1-正丙基-1-环戊烯	836.3	3-甲基-1-环戊烯	605.2	3-正己基-1-环戊烯	1109.4
1-正丁基-1-环戊烯	934.8	3-乙基-1-环戊烯	714.8	3-正庚基-1-环戊烯	1209.2
1-正戊基-1-环戊烯	1032.1	3-正丙基-1-环戊烯	813.0	3-正辛基-1-环戊烯	1309.1
1-正己基-1-环戊烯	1129.3				

表 13-71 环戊烯及环己烯保留指数（一）[53]

固定液	角鲨烷		Apiezon L		聚苯乙醚		聚乙二醇-4000	
柱温/℃	100		150		100		100	
保留指数 / 化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
环戊烯	560.0	2.32	—	—	—	—	704.9	2.92
3-甲基-1-环戊烯	610.4	1.23	—	—	679.6	3.17	735.8	2.57

续表

固定液	角鲨烷		Apiezon L		聚苯乙醚		聚乙二醇-4000	
柱温/℃	100		150		100		100	
保留指数 化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
1-甲基-1-环戊烯	650.6	0.92	—	—	730.1	2.97	791.9	2.60
3-乙基-1-环戊烯	721.8	1.63	—	—	789.2	2.70	849.2	3.16
1-乙基-1-环戊烯	753.2	1.17	—	—	832.4	2.69	891.1	2.66
3-正丙基-1-环戊烯	818.3	1.48	—	—	888.4	2.83	944.5	3.21
1-正丙基-1-环戊烯	840.5	1.18		—	916.2	2.64	972.1	3.16
3-正丁基-1-环戊烯	916.4	1.47		—	986.5	2.98	1042.2	3.76
1-正丁基-1-环戊烯	939.6	1.31		—	1014.8	2.75	1070.2	3.36
3-正戊基-1-环戊烯	1015.2	1.63	1047.3	3.10	1084.8	3.35	1140.2	3.72
1-正戊基-1-环戊烯	1036.5	1.25	1067.3	2.78	1112.1	3.28	1165.9	3.43
3-正己基-1-环戊烯	1115.6	1.73	1147.0	2.90	1185.3	3.53	1240.2	3.86
1-正己基-1-环戊烯	1134.8	1.53	1165.5	2.62	1210.0	3.23	1262.8	3.77
1-正庚基-1-环戊烯	1234.1	1.68	1264.7	2.60	1308.3	3.08	1361.8	3.76
3-异丙基-1-环戊烯	802.8	1.87	—	—	869.8	3.38	928.3	3.95
1-异丙基-1-环戊烯	915.9	1.61	—	—	884.5	2.45	937.5	2.70
3-异丁基-1-环戊烯	881.3	1.70	—	—	944.2	2.86	998.8	3.73
1-异丁基-1-环戊烯	891.8	1.65	—	—	955.2	2.93	1002.6	3.55
3-异戊基-1-环戊烯	978.3	1.63	—	—	1041.4	2.95	1094.2	3.74
1-异戊基-1-环戊烯	984.5	1.88	—	—		—	1107.6	3.92
3-烯丙基-1-环戊烯	797.3	2.16	—	—	901.0	3.21	985.1	3.72
1-烯丙基-1-环戊烯	821.6	1.48	—	—	932.3	2.70	1019.5	3.25
环己烯	683.1	2.11	—	—	780.3	4.54	849.7	4.32
3-甲基-1-环己烯	743.4	2.37	—	—	825.3	4.54	887.9	4.50
4-甲基-1-环己烯	746.4	2.44	—	—	829.7	4.68	893.1	4.72
1-甲基-1-环己烯	773.2	2.14	—	—	863.0	4.40	931.7	4.13
3-乙基-1-环己烯	852.7	2.28	—	—	939.5	4.82	1004.1	5.48
4-乙基-1-环己烯	855.5	2.48	—	—	942.9	4.88	1009.2	5.25
1-乙基-1-环己烯	867.1	1.86	—		958.1	3.95	1022.7	4.35
3-正丙基-1-环己烯	947.7	2.30	—	—	1032.1	4.55	1097.0	5.48
4-正丙基-1-环己烯	948.6	2.37	—	—	1034.2	4.55	1098.8	5.38
1-正丙基-1-环己烯	953.5	2.15	—	—	1039.3	4.09	1099.6	5.05
3-正丁基-1-环己烯	1045.0	2.37	—	—	1129.2	4.76	1192.8	6.18
4-正丁基-1-环己烯	1046.3	2.43	—	—	1131.5	4.89	1195.5	6.23
1-正丁基-1-环己烯	1050.4	2.22	—	—	1136.4	4.54	1297.5	5.96
3-正戊基-1-环己烯	1143.7	2.74	1186.8	3.32	1227.5	4.54	1290.7	5.32
1-正戊基-1-环己烯	1145.1	2.72	1186.3	3.18	1232.3	4.13	1291.9	4.83
1-正己基-1-环己烯	1243.3	2.72	1283.7	2.98	1328.9	4.10	1388.4	5.05
3-正己基-1-环己烯	1243.6	2.82	1286.5	3.26	1326.7	4.94	1390.2	5.40
1-正庚基-1-环己烯	1342.5	2.64	1382.9	3.34	1428.3	4.05	—	—
3-正庚基-1-环己烯	1343.5	2.72	1386.5	3.42	1426.3	4.75	—	—
1-正辛基-1-环己烯	—	—	1482.1	3.46	1525.8	4.55	—	—
3-正辛基-1-环己烯	—	—	1486.5	3.62	1526.2	4.60	—	—
1-正壬基-1-环己烯	—	—	1581.3	3.76	1623.7	4.87	—	—
3-正壬基-1-环己烯	—	—	1586.8	3.82	1625.9	4.67	—	
1-异丙基-1-环己烯	924.5	2.13	—	—	1008.0	4.89	1064.4	4.70
3-异丙基-1-环己烯	933.2	2.83	—	—	1017.8	5.25	1081.2	5.73
1-异丁基-1-环己烯	1002.9	2.61	—	—	1075.2	4.83	1128.8	5.00
3-异丁基-1-环己烯	1005.1	2.66	—	—	1080.7	4.80	1141.6	5.05
3-仲丁基-1-环己烯	1033.3	2.97	—	—	1120.3	5.78	1185.9	5.88

表 13-72 环戊烯及环己烯保留指数（二）[20]

固定液	角鲨烷				Apiezon L			PEG 4000			
柱温/℃	30	60	80	$\frac{\partial I}{\partial T}$	100	120	$\frac{\partial I}{\partial T}$	60	80	100	$\frac{\partial I}{\partial T}$
化合物 \ 保留指数	I				I			I			
环戊烯	549.6	550.7	555.5	0.14	—	—	—	693.3	700.7	704.9	0.28
3-甲基-1-环戊烯	601.5	605.8	607.7	0.13	627.2	633.2	0.30	725.6	728.7	735.8	0.25
1-甲基-1-环戊烯	644.5	646.6	649.0	0.10	672.9	677.4	0.23	781.5	786.0	791.9	0.26
3-乙基 1-环戊烯	712.9	715.3	718.7	0.13	742.6	747.8	0.26	836.5	842.8	849.2	0.35
1 乙基-1-环戊烯	747.4	748.4	750.9	0.08	774.7	779.4	0.24	880.5	885.9	891.1	0.27
3-异丙基-1-环戊烯	789.7	794.9	800.0	0.21	824.7	833.6	0.44	913.4	921.1	928.3	0.38
1-异丙基-1-环戊烯	804.5	809.4	812.5	0.16	834.1	839.2	0.19	926.6	931.8	937.5	0.27
3-烯丙基-1-环戊烯	700.0	701.2	705.0	0.12	731.0	735.9	0.24	926.6	934.8	940.9	0.36
1-烯丙基-1-环戊烯	812.5	818.2	821.6	0.18	850.8	856.4	0.28	1011.5	1018.8	1024.4	0.38
3-丙基-1-环戊烯	—	812.6	816.3	0.19	840.2	846.3	0.31	931.6	938.5	944.5	0.34
1-丙基 1-环戊烯	—	836.5	839.2	0.14	862.4	867.8	0.27	959.4	966.4	972.1	0.31
3-异丁基-1-环戊烯	—	874.5	878.8	0.22	—	—	—	983.9	991.3	998.8	0.42
1 异丁基-1-环戊烯	—	885.4	889.2	0.19	—	—	—	988.3	996.4	1002.6	0.36
3-丁基-1-环戊烯	—	910.5	914.3	0.19	938.6	944.1	0.28	1028.1	1036.6	1042.4	0.36
1-丁基-1-环戊烯	—	934.5	937.7	0.16	962.8	967.0	0.21	1057.8	1065.3	1070.5	0.41
3-异戊基-1-环戊烯	—	972.0	975.7	0.19	—	—	—	1081.7	1088.9	1095.2	0.29
1-异戊基-1-环戊烯	—	977.0	981.6	0.23	—	—	—	1091.8	1100.0	1107.6	0.40
3-戊基-1-环戊烯	—	1009.0	1013.1	0.21	1041.8	1043.0	0.06	1125.4	1134.0	1139.8	0.36
1-戊基-1-环戊烯	—	1031.4	1034.3	0.20	1059.8	1063.3	0.17	1151.8	1160.2	1165.6	0.35
环己烯	668.3	674.4	679.0	0.26	712.5	720.2	0.39	832.4	840.9	849.7	0.44
3-甲基-1-环己烯	727.1	733.7	738.8	0.22	768.5	776.8	0.41	870.0	879.2	887.9	0.45
4-甲基-1-环己烯	729.6	736.3	741.8	0.25	772.6	782.0	0.47	874.0	883.9	893.1	0.48
1-甲基-1-环己烯	758.5	764.3	769.3	0.22	800.0	808.3	0.41	914.9	923.1	931.7	0.42
3-乙基-1-环己烯	—	843.2	848.7	0.28	881.9	889.1	0.36	983.2	993.3	1004.1	0.53
4-乙基-1 环己烯	—	845.3	851.3	0.30	885.8	894.4	0.43	988.0	998.9	1009.2	0.51
1-乙基-1-环己烯	—	859.4	864.1	0.29	894.7	901.0	0.32	1005.3	1013.9	1022.7	0.44
3-烯丙基-1-环己烯	—	917.0	923.0	0.30	962.4	971.2	0.44	1122.2	1131.7	1142.2	0.48
1-烯丙基-1-环己烯	—	929.2	934.5	0.27	970.7	978.7	0.40	1134.2	1144.0	1154.1	0.50
3 丙基-1-环己烯	—	938.5	944.4	0.30	976.8	985.5	0.44	1075.0	1085.4	1097.0	0.55
4-丙基-1-环己烯	—	939.0	944.9	0.30	978.7	987.6	0.44	1077.0	1088.4	1098.8	0.54
1-丙基-1-环己烯	—	944.5	949.6	0.26	979.4	987.7	0.42	1079.3	1090.2	1099.6	0.51
3-丁基-1-环己烯	—	1035.9	1041.5	0.28	1073.6	1082.2	0.43	1171.9	1182.9	1192.9	0.53
4-丁基-1-环己烯	—	1036.4	1042.0	0.28	1075.4	1084.7	0.46	1174.5	1186.5	1195.8	0.53
1-丁基-1-环己烯	—	1041.8	1046.8	0.25	1076.7	1084.9	0.41	1177.1	1187.1	1196.9	0.50
3 仲丁基-1-环己烯	—	1022.1	1028.8	0.33	—	—	—	—	1176.0	1188.4	0.62
1-戊基-1-环己烯	—	—	—	—	1172.0	1180.1	0.40	—	1282.9	1292.1	0.46
3-异丙基-1-环己烯	—	915.9	921.0	0.26	948.2	956.3	0.42	1043.8	1053.9	1062.8	0.47
1-异丙基 1-环己烯	—	922.2	928.8	0.33	962.4	971.7	0.47	1058.1	1069.8	1082.3	0.60
3 异丁基-1-环己烯	—	992.5	998.2	0.29	1024.9	1034.9	0.46	1105.8	1117.9	1127.7	0.55
1-异丁基-1-环己烯	—	1000.9	1000.9	—	1031.0	1039.8	0.44	1119.8	1130.8	1141.4	0.41

表 13-73 环烯保留指数[4]

固定液	角鲨烷		Emulphor O		固定液	角鲨烷		Emulphor O	
化合物 \ I \ 柱温/℃	80	120	80	120	化合物 \ I \ 柱温/℃	80	120	80	120
环戊烯	552	559	635	649	顺环十二烯	—	1315	—	1440
环己烯	681	689	769	784	1-甲基环戊烯	647	660	724	737
环庚烯	785	800	878	900	1-甲基环己烯	769	781	853	865
反环辛烯	899	—	—	—	1-甲基环庚烯	863	874	947	969
顺环辛烯	895	913	993	1019	1-甲基环辛烯	969	983	1059	1084
反环壬烯	—	1024	—	1146	1-甲基环壬烯	—	1102	—	1214
顺环壬烯	—	1029	—	1147	反-1-甲基环癸烯	—	1200	—	1316
反环癸烯	—	1122	—	1239	顺-1-甲基环癸烯	—	1200	—	1316
顺环癸烯	—	1130	—	1251	反-1-甲基环十一烯	—	1292	—	1409
反环十一烯	—	1214	—	1330	顺-1-甲基环十一烯	—	1295	—	1415
顺环十一烯	—	1223	—	1346	反-1-甲基环十二烯	—	1382	—	1500
反环十二烯	—	1306	—	1421	顺-1-甲基环十二烯	—	1392	—	1513

第四节 芳烃的保留指数

表 13-74 烷基环戊二烯保留指数[114]

柱温：64 ℃

固定液	角鲨烷		Carbowax 20M	固定液	角鲨烷		Carbowax 20M
化合物 \ 保留指数	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	化合物 \ 保留指数	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I
1,3-环戊二烯	523.1	1.92	745.7	桥-二环戊二烯	989.1	3.25	1245.1
2-甲基-1,3-环戊二烯	624.4	1.33	834.2	2-正戊基-1,3-环戊二烯	1007.9	1.33	1205.0
1-甲基-1,3-环戊二烯	626.2	0.92	844.5	1-正戊基-1,3-环戊二烯	1011.8	1.33	1215.0
5-甲基-1,3-环戊二烯	645.9	1.17	870.4	5-正戊基-1,3-环戊二烯	1028.8	1.33	—
2-乙基-1,3-环戊二烯	723.8	0.75	930.3	2-正己基-1,3-环戊二烯	1107.1	1.42	1302.0
1-乙基-1,3-环戊二烯	727.6	0.75	940.4	1-正己基-1,3-环戊二烯	1111.1	1.42	1311.8
5-乙基-1,3-环戊二烯	747.6	0.92	966.7	5-正己基-1,3-环戊二烯	1128.4	1.42	1339.1
2-异丙基-1,3-环戊二烯	785.4	1.66	—	2-正庚基-1,3-环戊二烯	1206.4	1.58	1399.4
1-异丙基-1,3-环戊二烯	787.8	1.66	—	1-正庚基-1,3-环戊二烯	1210.5	1.58	1409.5
2-正丙基-1,3-环戊二烯	812.6	0.83	1010.0	5-正庚基-1,3-环戊二烯	1227.8	1.58	—
1-正丙基-1,3-环戊二烯	816.4	0.75	1020.2	2-正辛基-1,3-环戊二烯	1306.1	—	1497.1
5-正丙基-1,3-环戊二烯	835.1	0.75	1046.6	1-正辛基-1,3-环戊二烯	1309.9	—	1507.3
2-异丁基-1,3-环戊二烯	864.1	1.83	1043.6	5-正辛基-1,3-环戊二烯	1327.6	—	—
1-异丁基-1,3-环戊二烯	867.0	1.83	1052.1	2-正壬基-1,3-环戊二烯	1406.6	—	—
2-正丁基-1,3-环戊二烯	912.6	0.92	1108.2	1-正壬基-1,3-环戊二烯	1409.7	—	—
1-正丁基-1,3-环戊二烯	916.5	1.08	1118.1	2-正癸基-1,3-环戊二烯	1505.9	—	—
5-正丁基-1,3-环戊二烯	933.9	1.08	1144.5	1-正癸基-1,3-环戊二烯	1509.6	—	—
挂-二环戊二烯	986.2	—	—				

表 13-75 二环戊二烯衍生物保留指数[76]

柱温：140℃

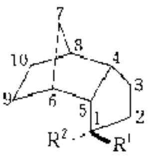
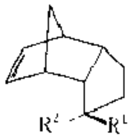
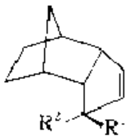
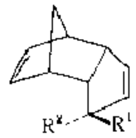
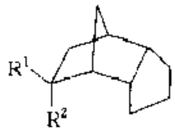
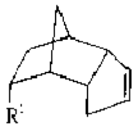
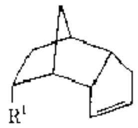
化合物	$R^1_反$	$R^2_顺$	OV-1	Carbowax 20M
	OH	H	1312	1957
	H	OH	1312	1967
	CH_3COO	H	1433	1872
	H	CH_3COO	1436	1850
	O		1309	1844
	OH	H	1267	1926
	H	OH	1267	1892
	CH_3COO	H	1376	1825
	H	CH_3COO	1393	1870
	O		1258	1810
	OH	H	1277	1951
	OH	H	1233	1943
	CH_3COO	H	1358	1970
	O		1260	1909
	H	OH	1321	1967
	OH	H	1319	1962
	OH	H	1279	1892
	OH	H	1283	1812

表 13-76 C_6～C_{12}环烷与环烯保留指数[4]

固定液	角鲨烷			Emulphor O		
化合物 \ 柱温/℃	70	80	120	70	80	120
环己烷	668	—	---	710		--
环己烯	677		-	764	—	--
1,3-环己二烯	655	--		796	-	---
1,4-环己二烯	694	—	—	840	—	—
苯	644	—	—	843	—	—
环辛烷	—	925	940	—	990	1012
顺环辛烯	—	896	1019	—	993	1019
反环辛烯	—	899	—	—	—	—
1,3-环辛二烯	—	889	—	—	1023	
1,4-环辛二烯	—	895	—	—	1034	—
1,5-环辛二烯	--	915	--	—	1074	—
1,3,5-环辛三烯	—	905	–		1100	—
环辛四烯	—	850	—	—	1078	—
双环[3.3.0]辛烷	—	870	—	-	936	—
双环[3.3.0]-2-辛烯	—	850	—	—	950	--
环癸烷	·	-	1147		-	1237
反环癸烯			1122	---	—	1241
顺环癸烯	—	—	1130	—	—	1252
顺-1,顺-6-环癸二烯	—	—	1108		—	1258
环十二烷	--	--	1326	---		1417
反环十二烯	—	—	1306	—	--	1421
顺环十二烯	—	—	1315	—	—	1440
反-1,反-5,反-9-环十二碳三烯	—	—	1256	—	-	1428
反-1,反-5,顺-9-环十二碳三烯	-	·	1279	—	—	1464
反-1,顺-5,顺-9-环十二碳三烯	·	—	1294	—	—	1490
顺-1,顺-5,顺-9-环十二碳三烯	—	—	1290	—	-	1493

表 13-77 环十二碳烯保留指数[133]

固定液	聚二甲基硅氧烷				聚氰基丙基甲基硅氧烷			
柱温/℃	160	170	180	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	160	170	180	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
保留指数 / 化合物	I				I			
反,反,反-环十二碳-1,5,9-三烯	1302.9	1312.0	1320.5	8.80	1379.0	1391.1	1400.0	10.50
反,反-环十二碳-1,5-二烯	1322.8	1332.4	1340.7	8.95	1391.5	1402.9	1413.1	10.80
顺,反,反-环十二碳-1,5,9-三烯	1328.8	1337.8	1346.4	8.80	1403.0	1414.4	1425.8	11.40
顺,顺,反-环十二碳-1,5,9-三烯	1334.6	1344.0	1352.5	8.96	1409.4	1420.5	1431.3	10.35
反环十二烯	1344.1	1353.5	1362.1	9.00	1409.4	1420.5	1431.3	10.95
顺,反-环十二碳-1,5-二烯	1346.3	1356.0	1364.5	9.10	1414.2	1425.2	1436.8	11.30
顺,顺-环十二碳-1,5-二烯	1354.4	1363.7	1372.2	8.90	1418.1	1429.7	1441.1	11.50
顺环十二烯	1358.0	1367.3	1376.3	9.05	1428.1	1439.3	1450.7	11.30
环十二碳烷	1360.2	1369.6	1378.3	9.05	1430.4	1442.5	1454.0	11.80

表 13-78 C_5～C_7环烯保留指数[4]

固定液	角鲨烷			Emulphor O		
柱温/℃ / I / 化合物	50	70	100	50	70	100
环戊烯	554	—	—	631	—	—
甲基环戊烷	633	—	—	661	—	—
亚甲基环戊烷	650	—	—	723	—	—
1-甲基-1-环戊烯	647	—	—	716	—	
3-甲基-1-环戊烯	607	—	—	668	—	—
4-甲基-1-环戊烯	610	—	—	671	—	—
双环[3.1.0]己烷	670	—		745	—	—
环己烯	—	677	—	—	764	—
甲基环己烷	—	730	—	—	764	—
亚甲基环己烷	—	736	—	—	817	—
1-甲基-1-环己烯	—	766	—	—	847	—
3-甲基-1-环己烯	—	736	—	—	810	—
4-甲基-1-环己烯	—	739	—	—	813	—
双环[4.1.0]庚烷	—	796	—	—	881	—
环庚烯	—	782	—	—	869	—
甲基环庚烷	—	864	—	—	909	—
亚甲基环庚烷	—	861	—	—	949	—
1-甲基-1-环庚烯	—	862	—	—	941	—
3-甲基-1-环庚烯	—	847	—	—	924	—
4-甲基-1-环庚烯	—	849	—	—	927	—
5-甲基-1-环庚烯		851	—	—	930	—
双环[5.1.0]辛烷	—	885		—	968	—
顺环辛烯	—	—	905	—	—	—
甲基环辛烷	—	—	992	—	—	1054
1-甲基-1-环辛烯	—	—	978	—	—	—
3-甲基-1-环辛烯	—	—	958		—	—
4-甲基-1-环辛烯	—	—	963	—	—	—
5-甲基-1-环辛烯	—	—	973	—	—	—
双环[6.1.0]壬烷	—	—	1003	—	—	—

表 13-79　烃基环烷与环烯保留指数[4]

固定液	角鲨烷		Emulphor O		固定液	角鲨烷		Emulphor O	
柱温/°C（I） 化合物	70	120	70	120	柱温/°C（I） 化合物	70	120	70	120
乙基环己烷	839	—	875	—	乙基环戊烯	749	—	821	—
乙烯基环己烷	818	—	894	—	正丙基环戊烷	834	—	865	—
亚乙基环己烷	859	—	942	—	亚丙基环戊烷	853	—	929	—
1乙基环己烯	861	—	942		1丙基环丙烯	839	—	906	—
1-乙基3-环己烯	848	—	926	—	1-正丙基环庚烯	—	1056	—	1144
1-乙烯基3-环己烯	824	—	940	—	1-正丁基环庚烷	—	1171	—	1227
乙基苯	840	—	1026	—	1-正丁基环庚烯	—	1151		1234
乙烯基苯	867	—	1118	—	1-亚丁基环庚烷	—	1163	—	1254
乙基环戊烷	738	—	—	—	1-正丙基环辛烯	—	1166	—	1259

表 13-80　烷基环烷与环烯保留指数[9]

固定液：角鲨烷

柱温/°C	30	50	70	$10(\frac{\partial I}{\partial T})$	柱温/°C	30	50	70	$10(\frac{\partial I}{\partial T})$
保留指数 化合物	I				保留指数 化合物	I			
环戊烷	563.2	565.7	568.2	1.23	1,顺-3-二甲基环己烷	780.6	785.7	790.7	2.52
甲基环戊烷	626.0	628.5	631.0	1.26	1,反-4-二甲基环己烷	780.4	785.9	791.4	2.77
1,1-二甲基环戊烷	671.3	674.3	677.3	1.50	1,1-二甲基环己烷	780.9	787.3	793.7	3.20
1,顺-3二甲基环戊烷	680.8	683.4	686.0	1.32	1,反-2二甲基环己烷	797.0	802.8	808.6	2.90
1,反-2-二甲基环戊烷	687.4	690.1	692.7	1.34	1,顺-4二甲基环己烷	799.3	805.2	811.1	2.95
1,顺-2-二甲基环戊烷	716.4	721.0	725.6	2.30	1,反-3-二甲基环己烷	800.7	806.1	811.5	2.70
1,1,3-三甲基环戊烷	719.5	723.8	728.1	2.15	1,顺-2-二甲基环己烷	823.8	830.0	836.1	3.08
乙基环戊烷	730.0	734.1	738.2	2.05	乙基环己烷	828.5	834.4	840.3	2.95
顺-1,反-2,顺-4三甲基环戊烷	738.1	741.5	744.8	1.67	1,1,3-三甲基环己烷	835.3	841.1	846.9	2.90
顺1,反-2,顺-3三甲基环戊烷	711.6	714.8	718.0	1.61	1,1,2-三甲基环己烷	876.1	883.7	891.3	3.80
1,1,2三甲基环戊烷	761.0	764.4	767.8	1.72	环戊烯	545.6	548.6	551.1	1.36
顺-1,顺-2,反-4-三甲基环戊烷	768.4	773.2	780.0	2.40	1-甲基环戊烯	641.6	644.0	645.5	1.23
1-甲基,顺-3-乙基环戊烷	787.8	791.4	795.0	1.80	3-甲基环戊烯	600.1	603.1	605.1	1.50
1甲基,反-2-乙基环戊烷	786.6	790.9	795.3	2.18	3-乙基环戊烯	708.8	714.4	716.0	1.78
1-甲基-1-乙基环戊烷	789.7	794.7	799.7	2.50	1,2-二甲基环戊烯	740.8	742.9	744.9	1.04
顺-1,顺2,顺-3-三甲基环戊烷	797.1	803.0	808.9	2.95	1-乙基环戊烯	743.7	746.0	748.0	1.18
异丙基环戊烷	807.4	812.7	818.0	2.65	环己烯	666.2	671.0	675.7	2.36
1-甲基-顺-2-乙基环戊烷	816.5	821.3	826.2	2.43	3-甲基环己烯	725.8	730.7	735.7	2.49
丙基环戊烷	826.6	830.6	834.5	1.98	4-甲基环己烯	727.9	733.1	738.4	2.61
环己烷	660.0	663.7	667.5	1.86	1-甲基环己烯	757.1	761.6	766.1	2.25
甲基环己烷	720.7	726.2	731.6	2.73					

表 13-81　烷基环戊烷和环戊烯的保留指数[27]

固定液	角鲨烷				聚丙二醇			
柱温/°C（I） 化合物	60	80	100	120	60	80	100	120
环戊烷	567.35	570.17	572.96	576.16	592.40	596.17	599.63	603.40
甲基环戊烷	629.43	632.96	636.05	—	649.93	654.28	659.46	—
1,1-二甲基环戊烷	675.23	679.11	683.81	—	689.66	694.58	700.00	—
顺1,3二甲基环戊烷	684.35	687.96	692.32	—	697.68	702.09	706.37	—

续表

固定液	角鲨烷				聚丙二醇			
I　柱温/℃ 化合物	60	80	100	120	60	80	100	120
反-1,3-二甲基环戊烷	688.58	692.24	697.41	—	701.98	706.61	712.48	—
反-1,2-二甲基环戊烷	691.00	694.56	697.41	—	705.40	709.80	712.48	—
顺-1,2-二甲基环戊烷	722.98	727.63	732.55	—	743.62	749.42	755.42	—
乙基环戊烷	735.79	739.87	743.99	—	756.10	761.37	767.00	·
顺-1,3-甲基乙基环戊烷	789.96	793.79	798.15	—	803.02	807.91	813.23	—
反-1,3-甲基乙基环戊烷	792.68	796.96	801.21	—	806.09	811.27	817.33	
反-1,2-甲基乙基环戊烷	793.24	796.96	801.21	—	807.95	812.92	817.33	—
1,1-甲基乙基环戊烷	796.64	801.61	806.88	—	814.29	820.62	827.18	—
仲丙基环戊烷	814.96	820.10	825.41	—	832.65	839.35	846.27	—
顺-1,2-甲基乙基环戊烷	823.43	828.25	833.27	—	843.61	849.76	856.46	—
丙基环戊烷	832.30	836.21	840.24	—	851.90	857.01	862.54	—
1,1-甲基丙基环戊烷	884.29	889.39	893.51	898.87	889.86	906.24	912.82	918.77
反-1,2-甲基丙基环戊烷	884.29	888.20	892.20	896.93	898.08	902.96	908.34	913.77
顺-1,3-甲基丙基环戊烷	885.59	889.39	893.51	898.87	898.08	902.96	908.34	913.77
反-1,3-甲基丙基环戊烷	887.03	891.06	894.94	898.87	899.86	904.69	910.26	913.77
1,3-甲基异丁基环戊烷	891.53	859.86	900.09	904.41	907.91	913.29	919.06	924.46
顺-1,2-甲基正丙基环戊烷	913.40	918.01	922.61	927.16	933.07	939.02	945.46	951.54
仲丁基环戊烷	921.58	926.94	932.37	937.63	941.56	948.59	956.09	963.26
正丁基环戊烷	930.02	933.98	937.90	941.84	950.00	955.21	960.10	966.10
1,1-甲基正丁基环戊烷	—	981.90	987.12	991.02	—	1000.55	1005.83	1012.43
反-1,2-甲基正丁基环戊烷		983.11	987.12	991.02		998.73	1003.83	1008.68
顺-1,3-甲基正丁基环戊烷	—	986.86	990.97	994.68	—	1000.55	1000.83	1060.66
反-1,3-甲基正丁基环戊烷	—	988.37	992.55	996.30	—	1002.54	1007.65	1012.43
(3-甲基丁基)环戊烷	—	995.58	1000.01	1004.01	—	1014.36	1019.80	1025.21
(2-甲基丁基)环戊烷		998.44	1003.31	1007.75	—	1018.58	1024.73	1030.81
顺-1,2-甲基正丁基环戊烷	—	1012.46	1017.29	1021.61	·	1034.20	1040.28	1046.26
1-甲基-2-仲戊基环戊烷	—	1013.99	1019.45	1024.52		1035.38	1042.33	1049.11
正戊基环戊烷	—	1033.04	1037.50	1041.08	—	1054.57	1060.66	1065.46
1,1-甲基正戊基环戊烷	—	1078.17	1083.07	1088.36	—	1096.43	1102.43	1109.39
(反-1,2-甲基正戊基)环戊烷	—	1080.63	1084.70	1088.36	—	1096.43	1101.45	1106.04
(顺-1,3-甲基正戊基)环戊烷	—	1085.93	1089.78	1093.62	—	1099.60	1104.85	1109.39
(4-甲基戊基)环戊烷	—	1086.43	1091.15	1095.16	—	1105.67	1111.61	1116.85
(反-1,3-甲基正戊基)环戊烷	—	1087.03	1091.15	1095.16	—	1101.29	1106.63	1111.31
(2-甲基戊基)环戊烷	—	1095.00	1099.67	1103.89	—	1113.64	1119.64	1124.55
(3-甲基戊基)环戊烷	—	1100.14	1105.04	1109.45	—	1121.38	1127.57	1133.11
仲己基环戊烷	—	1108.13	1113.59	1118.47	—	1129.78	1136.79	1143.08
顺-1,2-甲基正戊基环戊烷	—	1110.57	1115.55	1119.91	—	1132.35	1138.63	1144.03
正己基环戊烷	—	1133.18	1137.50	1141.35	—	1154.81	1160.43	1165.63
反-1-甲基-3-异丁基环戊烷	—	948.06	952.29	956.49	—	957.14	962.11	967.16
顺-1-甲基-3-异丁基环戊烷	—	948.06	952.29	956.49	—	957.14	962.11	967.16
反-1,2-乙基正丁基环戊烷	—	—	1083.08	1087.09	—	—	1099.12	1103.87
顺-1,2-乙基正丁基环戊烷	—	—	1108.8	1117.69	—	—	1129.14	1134.87
1-甲基环戊烯	—	648.4	650.4	—	—	—	—	—
2-甲基环戊烯	—	607.4	610.7		—	—	—	—
1-乙基环戊烯	—	749.9	752.0	—	—	—	—	—
环亚戊基乙烷	—	772.3	776.1	-	—	—	—	—
正丙基环戊烯	—	838.3	840.8	—	—	—	—	—

续表

固　定　液	角　鲨　烷				聚　丙　二　醇			
I 柱温/℃ 化合物	60	80	100	120	60	80	100	120
环亚戊基丙烷	—	853.6	856.6	—		—	—	—
正丁基环戊烯	—	937.1	940.1	—	—	—	—	—
环亚戊基正丁烷	—	945.9	949.4	—	—	—	—	—
异戊基环戊烯	—	1001.4	1004.7	—	—	—	—	-
环亚戊基异戊烷	—	1003.4	1007.5	—	—	—	—	—
1-(-1-戊烯)-环戊烷	—	—	1020.7	—	—	—	—	—
环亚戊基-1-戊烯	·	—	1028.5	—	—	—	—	·
异戊基环戊烯	—	992.8	997.3	—	-	—	—	—
环亚戊基异戊烷	—	979.1	983.4	—		—	—	—
正戊基环戊烯	—	1034.4	1037.1	—	—	—	—	—
环亚戊基正戊烷	—	1045.0	1048.0	—	—	—	—	—
1 亚甲基 3 甲基环戊烷	—	706.04	709.40	713.02	—	753.85	757.47	761.77
异丁基环戊烷	—	891.76	894.75	897.89	—	935.70	939.61	943.59
环亚戊基异丁烷	—	916.94	919.45	922.48	·	969.56	973.16	976.87
3,2-甲基正丙基-1-环戊烯	—	891.5	894.7	·	—	—	—	—
1,2-甲基正丙基-1 环戊烯	—	908.9	912.4	—	—	—	·	·
3,2 甲基正丁基-1-环戊烯		—	890.5	—	—	—	—	—
1,2-甲基正丁基-1-环戊烯	—	—	1006.8		—	—	—	—
反-1-甲基-3-异亚丁基环戊烷	—	943.98	946.55	950.34	—	980.26	983.60	987.18
顺 1 甲基 3-异亚丁基环戊烷		994.40	917.50	950.34	-	980.26	983.60	987.18
反-1 甲基-3-异丁烯基环戊烷	—	968.32	971.37	974.89	—	1013.50	1017.50	1021.61
顺-1-甲基-3-异丁烯基环戊烷	—	969.44	972.47	974.89	—	1015.52	1019.13	1021.61

表 13-82　环烷与环烯的保留指数（一）[81]

固定液：SE-30

I 柱温/℃ 化合物	80	130	*I* 柱温/℃ 化合物	80	130
环戊烷	570	582	反-1,4-二甲基环己烷	785	—
甲基环戊烷	634	—	正丙基环己烷	931	947
乙基环戊烷	739	750	异丙基环己烷	915	929
乙烯基环戊烷	727	738	正丁基环己烷	1030	1045
环戊烯	558	564	亚甲基环己烷	745	758
3-甲基-1-环戊烯	615	—	乙烯基环己烷	824	839
1-甲基-1-环戊烯	654	660	亚乙基环己烷	870	884
1,2-二甲基-1-环戊烯	764	774	烯丙基环己烷	919	935
1,3 环戊二烯	540	546	环己烯	681	694
5 甲基-1,3-环戊二烯	639	645	4-甲基-1 环己烯	743	754
环己烷	669	683	3-甲基 1-环己烯	743	754
甲基环己烷	730	744	1-甲基-1-环己烯	772	784
乙基环己烷	837	853	1,3-二甲基-1-环己烯	825	836
顺-1,2-二甲基环己烷	834	—	1,4-二甲基-1 环己烯	825	836
反-1,2-二甲基环己烷	804	—	4-乙烯基-环己烯	833	848
顺-1,3-二甲基环己烷	804	—	香叶烯	983	986
反-1,3-二甲基环己烷	783	—	对伞花烃	1013	1027
顺-1,4-二甲基环己烷	810	—	1-盖烯	1019	1036

续表

化合物 \ 柱温/℃ I	80	130	化合物 \ 柱温/℃ I	80	130
二戊烯	1019	1036	环庚烷	800	815
蒈烯	1023	1038	环庚烯	788	806
1,3-环己二烯	671	684	1,3-环庚二烯	815	831
1,4-环己二烯	706	718	1,3,5-环庚三烯	784	800
1-甲基-1,3-环己二烯	771	—	环辛烷	920	941
1-甲基-1,4-环己二烯	800	—	环辛烯	900	922
1-乙基-1,4-环己二烯	900	910	1,5-环辛二烯	926	946

表 13-83 环烷与环烯的保留指数（二）[87]

固定液：聚苯醚　　柱温：80℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
异戊间二烯	602	2,4-己二烯	770	1,4-环己二烯	847
1,3-环戊二烯	694	环己烯	788	甲基环己烯	870
环戊烷	660	1,3-环己二烯	806	甲基-1,4-环己二烯	884
环戊烯	671	苯	827	乙基环己烷	890
1-甲基环戊烯	707	甲基环己烷	840	1,7-辛二烯	916

表 13-84 环烯保留指数（一）[11]

柱温：80℃

化合物 \ 固定液 I	角鲨烷	BP-1	OV-101	SE-54	OV-1701	OV-215	OV-210
1,3-环戊二烯	510.5	540.8	541.5	549.5	—	604.2	613.0
环戊烯	547.7	559.0	559.7	566.5	—	574.3	591.3
2-甲基-1,3-环戊二烯	627.5	640.9	641.9	649.6	678.9	711.2	703.0
1-甲基-1,3-环戊二烯	627.5	640.9	641.9	652.8	685.5	711.2	718.0
亚甲基环戊烷	—	651.9	653.5	—	—	681.7	692.4
1-甲基环戊烯	646.3	654.4	653.5	659.9	—	670.1	677.6
环己烯	676.8	683.7	683.2	693.0	711.1	708.6	721.2
2,5-降冰片二烯	686.3	707.6	706.9	718.3	745.3	759.9	770.3
2-降冰片烯	714.6	—	725.7	735.2	754.5	766.1	775.1
3-甲基环己烯	737.7	744.3	742.3	749.7	767.3	771.3	778.6
亚甲基环己烷	737.8	745.0	744.5	754.1	772.9	779.0	791.0
4-甲基环己烯	739.9	744.4	744.3	751.2	769.3	771.4	785.8
1-甲基环己烯	768.5	771.7	771.2	780.4	—	793.0	802.7
5-亚甲基-2-降冰片烯	777.9	800.0	798.0	810.3	837.5	849.9	861.4
乙烯基环己烷	821.4	823.4	823.2	831.9	850.5	861.9	869.9
4-乙烯基环己烯	825.1	833.0	832.8	843.6	869.5	875.4	885.8
顺双环[3.3.0]-2-辛烯	848.7	—	856.7	867.8	—	895.2	906.0
亚乙基环己烷	861.8	868.9	868.8	878.0	—	895.6	905.3
5-乙烯基-2-降冰片烯	864.7	881.3	881.2	892.7	919.8	934.7	945.4
5-亚乙基-2-降冰片烯	891.8	911.1	910.1	922.6	948.7	948.9	960.0
桥二环戊二烯	1000.3	1017.2	1016.4	1032.4	1065.5	1082.2	1095.8
双环[4.3.0]壬-3,6(1)-二烯	1031.5	1039.5	1038.8	1056.6	—	1136.6	—
顺环癸烯	1111.3	—	1112.6	1126.5	1156.1	1159.9	1183.5
反,顺,顺-环十二碳二烯	1270.4	—	—	1303.3	—	1355.2	—
(-)-α-雪松烯	1379.1	—	—	1388.5	—	1452.5	—

表 13-85　环烯保留指数（二）[111]

柱温：100℃

化合物 ＼ 固定液　I	角鲨烷	BP-1	OV-101	SE 54	OV 1701	OV-215	OV-210
1,3-环戊二烯	534.7	543.3	545.3	552.3	—	606.8	615.6
环戊烯	562.3	562.5	561.4	569.5	—	579.6	600.0
2-甲基-1,3-环戊二烯	630.0	643.8	644.0	653.8	—	722.4	711.3
1-甲基-1,3-环戊二烯	630.0	643.8	644.0	653.8		722.4	724.3
亚甲基环戊烷	—	657.0	657.2	—	—	683.8	699.9
1-甲基环戊烯	651.0	657.6	654.4	663.1	—	674.4	682.9
环己烯	680.5	688.4	688.1	698.0	718.6	712.9	729.7
2,5-降冰片二烯	691.1	712.3	710.8	722.8	751.6	766.5	777.8
2-降冰片烯	721.2	—	731.3	741.1	760.8	775.5	785.9
3-甲基环己烯	742.9	748.4	746.8	755.8	773.5	776.3	786.8
亚甲基环己烯	743.0	750.2	749.8	759.3	780.4	789.2	799.7
4-甲基环己烯	744.6	748.7	748.1	757.5	777.7	780.4	792.7
1-甲基环己烯	771.5	776.5	775.5	785.3	—	797.4	807.9
5-亚甲基-2-降冰片烯	782.0	800.1	802.8	816.0	844.2	852.5	869.4
乙烯基环己烷	826.7	829.6	828.8	838.5	857.7	865.9	879.0
4-乙烯基环己烯	829.5	838.8	837.9	850.3	876.5	878.7	893.0
顺双环[3.3.0]-2-辛烯	853.9	—	863.1	875.1	—	907.0	917.3
亚乙基环己烷	865.9	874.5	873.4	884.4	—	914.0	911.4
5-乙烯基-2-降冰片烯	868.6	887.9	886.8	899.7	927.7	940.4	954.4
5-亚乙基-2-降冰片烯	895.4	916.5	915.2	928.4	955.1	952.6	966.4
桥二环戊二烯	1005.0	1026.9	1025.3	1043.2	1071.8	1093.6	1110.3
双环[4.3.0]-3,6(1)-壬二烯	1037.5	1047.6	1046.6	1066.4		1146.6	—
顺环癸烯	1121.4	—	1122.5	1139.1	1168.6	1181.3	1197.3
反,顺,顺-1,5,9-环十二碳三烯	1283.2	—	1296.7	1317.2	—	1382.0	—
(−)-α-雪松烯	1392.3	—	1392.6	1403.3	—	1471.8	—

表 13-86　环烷、环烯与环二烯的保留指数[112]

固定液	OV-1		Ucon LB 550X		固定液	OV-1		Ucon LB 550X	
柱温/℃	100		40	100	柱温/℃	100		40	100
化合物 ＼ 保留指数	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I		化合物 ＼ 保留指数	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	
环己烷	671.1	1.8	677.2	—	顺环癸烯	1122.5	5.7	—	1172.3
环己烯	687.5	2.0	713.2	—	反环癸烯	1107.1	5.5	—	1161.2
环己-1,3-二烯	673.1	1.8	723.5	—	顺-1,反-5-环癸二烯	1099.8	5.4	—	1164.9
环己-1,4-二烯	709.2	2.4	762.8		环十一烷	1225.4	6.4	—	1260.7
环庚烷	806.9	3.7	809.9	—	顺环十一烯	1215.3	6.7	—	1266.1
环庚烯	794.2	3.4	815.7	—	反环十一烯	1201.8	6.3	—	1251.0
环庚-1,3-二烯	820.3	3.2	873.6	—	反,反-1,5-环十一碳二烯	1177.6	6.3	—	1241.5
环辛烷	927.2	4.3	—	957.7	顺-1,反-5-环十一碳二烯	1196.0	6.4	—	1260.7
顺环辛烯	904.8	4.0	—	951.8	环十二烷	1323.7	7.9	—	1344.5
顺,顺-1,3-环辛二烯	904.6	4.7	—	965.5	顺-环十二烯	1306.1	7.3	—	1356.0
顺,顺-1,4-环辛二烯	909.5	3.6	—	974.5	反-环十二烯	1291.5	7.4	—	1340.7
顺,顺-1,5-环辛二烯	931.1	3.9		1005.1	顺,顺-1,5-环十二碳二烯	1304.8	7.1	—	1373.6
环壬烷	1035.7	5.0	—	1070.0	反,反-1,5-环十二碳二烯	1273.5	6.8	—	1339.7
顺环壬烯	1023.6	5.1	—	1073.7	顺-1,反-5-环十二碳二烯	1292.1	7.3	—	1360.5
反环壬烯	1014.5	5.1	—	1066.7	环十三烷	1406.4	8.4	—	—
顺,顺-1,5-环壬二烯	1001.8	4.6	—	1065.4	顺环十三烯	1401.3	7.5	—	—
环癸烷	1133.9	5.9	—	1168.5	反环十三烯	1379.1	8.9	—	—

表 13-87 烷基苯保留指数 (一)[146]

固定液：角鲨烷　　柱温：25℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
苯	629.9	叔丁基苯	956.5	1-甲基-2-正丙基苯	1022.8
甲苯	739.1	异丁基苯	963.7	1,3-二甲基-5-乙基苯	1029.7
乙基苯	828.2	1,2,4-三甲基苯	965.9	1,4-二甲基-2-乙基苯	1039.3
对二甲苯	842.5	仲丁基苯	967.1	1,2-二甲基-4-乙基苯	1044.9
间二甲苯	845.7	1-甲基-2-异丙基苯	994.6	1,3-二甲基-4-乙基苯	1044.1
邻二甲苯	862.7	1-甲基-3-异丙基苯	991.4	1-甲基-4-叔丁基苯	1053.1
异丙基苯	889.5	1-甲基-4-异丙基苯	996.8	1,2,3,5-四甲基苯	1086.4
正丙基苯	917.8	1,3-二甲基苯	1009.4	1,2,3,4-四甲基苯	1097.0
1-甲基-3-乙基苯	930.2	1-甲基-4-正丙基苯	1015.7	1-甲基-4-正丙基苯	1102.1
1-甲基-4-乙基苯	934.4	1-甲基-3-正丙基苯	1014.7	正戊基苯	1110.6
1-甲基-2-乙基苯	946.1	1,4-二乙基苯	1017.8		
1,3,5-三甲基苯	953.1	正丁基苯	1018.5		

表 13-88 烷基苯保留指数 (二)[84]

固定液：角鲨烷

化合物 \ 柱温/℃	86	96	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	化合物 \ 柱温/℃	86	96	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
保留指数	I			保留指数	I		
苯	648.0	650.22	2.2	1-甲基-4-正丙基苯	1035.9	1038.8	2.9
甲苯	755.0	757.1	2.1	1-甲基-2-正丙基苯	1042.0	1045.4	3.4
苯乙炔	830.4	834.1	3.7	反-十氢化萘	1064.7	1069.3	4.6
乙基苯	845.3	847.7	2.4	顺-十氢化萘	1101.4	1106.2	4.8
对二甲苯	859.0	861.2	2.3	叔戊基苯	1065.9	1069.5	3.6
间二甲苯	861.0	863.2	2.2	仲戊基苯	1074.7	1077.8	3.1
邻二甲苯	880.8	883.0	2.2	异戊基苯	1094.9	1098.4	3.5
异丙基苯	904.1	906.7	2.6	正戊基苯	1131.3	1136.2	4.9
烯丙基苯	917.8	920.0	2.2	1-甲基-3-叔丁基苯	1053.6	1056.1	2.6
正丙基苯	932.7	935.1	2.4	1-甲基-4-叔丁基苯	1072.3	1074.7	2.4
苯乙烯	872.0	874.5	2.5	1-甲基-2-叔丁基苯	1088.4	1090.9	2.5
α-甲基苯乙烯	957.8	960.0	2.2	2,4-二甲基苯乙烯	1080.9	1084.2	3.3
2-甲基苯乙烯	972.1	974.2	2.1	1-甲基-4-仲丁基苯	1088.7	1091.0	2.3
3-甲基苯乙烯	976.3	978.7	2.4	1-乙基-3-异丙基苯	1074.3	1076.5	2.2
4-甲基苯乙烯	978.6	980.3	1.7	1-乙基-2-异丙基苯	1076.9	1079.8	2.9
1-甲基-3-乙基苯	945.9	947.4	1.5	1-乙基-4-异丙基苯	1094.5	1097.3	2.8
1-甲基-4-乙基苯	948.2	950.4	2.2	1,2,4,5-四甲基苯	1102.8	1105.9	3.1
1-甲基-2-乙基苯	961.1	963.4	2.3	1,2,3,5-四甲基苯	1108.4	1111.4	3.0
1,3,5-三甲基苯	965.0	967.1	2.1	1,2,3,4-四甲基苯	1129.2	1132.7	3.5
1,2,4-三甲基苯	982.0	985.3	2.5	1-乙基-3-正丙基苯	1108.4	1111.1	2.7
1,2,3-三甲基苯	1007.8	1010.5	2.7	1-乙基-2-正丙基苯	1116.7	1119.2	2.5
叔丁基苯	969.9	972.5	2.6	1-乙基-4-正丙基苯	1121.9	1125.2	3.3
异丁基苯	985.5	988.3	2.8	1,3-二异丙基苯	1116.3	1118.8	2.5
仲丁基苯	986.4	989.1	2.7	1,2-二异丙基苯	1118.1	1120.3	2.2
正丁基苯	1032.3	1034.9	2.6	1,4-二异丙基苯	1151.2	1153.4	2.2
1-甲基-3-异丙基苯	1000.3	1001.8	1.5	1,2-二氢萘	1127.9	1133.2	5.3
1-甲基-4-异丙基苯	1007.7	1009.9	2.2	1,2,3,4-四氢萘	1133.2	1137.6	4.4
1-甲基-2-异丙基苯	1013.5	1015.8	2.3	萘	1146.0	1151.8	5.8
2,3-二氢茚	1011.2	1014.5	3.3	1-乙基-4-叔丁基苯	1158.5	1161.0	2.5
茚	1011.8	1015.7	3.9	1,4-二甲基-2-正丁基苯	1165.3	1167.1	1.8
2-甲基茚	1054.1	1057.7	3.6	1,3,5-三乙基苯	1189.1	1190.8	1.7
1,2-二甲基茚满	1124.7	1128.8	4.1	1,2,4-三乙基苯	1206.3	1208.0	1.7
5-乙基茚	—	1203.6	—	正己基苯	1225.4	1228.8	3.4
1,3-二乙基苯	1025.7	1028.1	2.4	五甲基苯	1253.9	1258.6	4.7
1,2-二乙基苯	1034.8	1038.1	3.3	1-甲基萘	1264.7	1267.9	3.2
1,4-二乙基苯	1036.8	1039.3	2.5	2-甲基萘	1265.5	1271.1	5.6
1-甲基-3-正丙基苯	1030.4	1032.8	2.4	1,3,5-三异丙基苯	1285.7	1287.5	1.8

表 13-89 烷基苯保留指数（三）[45]

固定液：角鲨烷

化合物 \ I \ 柱温/℃	92	130	化合物 \ I \ 柱温/℃	92	130
苯	650.2	656.2	1,3-二乙苯	1028	1036
甲苯	758	764.4	正丁(基)苯	1035	1044.4
乙苯	847	853.7	1,2-二乙苯	1039	1052.8
1,4-二甲苯	861	868.2	1,4-二乙苯	1039	1052.8
1,3-二甲苯	863	870	1-甲基-2-正丙(基)苯	1045	1052.3
苯乙烯	880	889.6	1,4-二甲基-2-乙(基)苯	1060	1073.8
1,2-二甲苯	883	892.2	1,3-二甲基-2-乙(基)苯	1071	1081.6
异丙(基)苯	906	914.5	2,5-二甲基苯乙烯	—	1091.4
正丙(基)苯	935	941.8	2,6-二甲基苯乙烯	—	1107.1
1-甲基-3-乙基苯	948	953.3	1,2,3,5-四甲苯	1111	1123.9
α-甲基苯乙烯	956	962.6	2,4-二甲基苯乙烯	·	1129.3
1-甲基-2-乙基苯	964	972..	1-乙基-2-正丙(基)苯	1115	1131.6
1,3,5-三甲苯	968	974	1,2-二甲基叔丁(基)苯	1150	1159.8
叔丁(基)苯	973	980	1,4-二异丙(基)苯	1152	1163.2
1,2,4-三甲苯	986	993.6	3-正丙基-1,2-二甲(基)苯	—	1168.4
1-甲基-3-异丙(基)苯	1002	1012	1-甲基-5-乙基-2-正丙(基)苯	—	1188.5
1-甲基-4-异丙(基)苯	1010	1019.2	1-甲基-2-正丙基-4-异丙(基)苯	—	1275.5
1,2,3-三甲苯	1011	1023	1-甲基-3,5-二异丙(基)苯	-	1291.7
1-甲基-2-异丙(基)苯	1015	1027.6			

表 13-90 烷基苯保留指数（四）[132]

固定液：角鲨烷　柱温：100℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
苯	649.4	1,3-二甲基苯	864.7	1,2,4-三甲基苯	986.5
甲苯	757.1	1,2-二甲基苯	884.5	1,2,3-三甲基苯	1012.7
乙基苯	849.0	异丙基苯	908.0	叔丁基苯	974.6
1,4-二甲基苯	862.6	1,3,5-三甲基苯	969.4		

表 13-91 烷基苯保留指数（五）[69]

固定液	角鲨烷	SE-30	固定液	角鲨烷	SE-30
化合物 \ I \ 柱温/℃	80	65	化合物 \ I \ 柱温/℃	80	65
1-甲基-2-异丙基苯	1010.4	1016.9	1,2-二乙基苯	1033.0	1042.7
1,3-二乙基苯	1023.2	1031.5	1,4-二乙基苯	1033.8	1037.1
1-甲基-3-正丙基苯	1027.8	1031.6	1,3-二甲基,5-乙基苯	1043.5	1042.7
正丁基苯	1029.4	1037.4	1-甲基-2-正丙基苯	1039.4	1045.8
1-甲基,4-正丙基苯	1033.0	1035.4			

表 13-92 烷基苯保留指数（六）[126]

固定液：SE-30 柱温：65℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
苯	655.1	2,3-二氢茚	1012.3	1,2,3,5-四甲苯	1096.1
甲苯	757.6	茚	1018.2	1,2,3,4-四甲苯	1120.0
乙苯	848.9	1,3-二乙苯	1022.3	1-甲基-3-异丙苯	997.3
对二甲苯	857.3	异丁苯	993.2	1-甲基-2-异丙苯	1016.2
间二甲苯	857.3	正丁苯	1038.2	1-甲基-4-异丙苯	1002.7
苯乙烯	873.2	1,4-二甲苯	1038.2	间甲基苯乙烯	928.0
邻二甲苯	878.6	1,3-甲基正丙苯	1031.0	邻甲基苯乙烯	963.2
异丙苯	911.6	1,4-二乙苯	1038.8	对甲基苯乙烯	977.8
正丙苯	936.8	1,3-二甲基-5-乙苯	1043.4	邻乙基苯乙烯	1057.1
间甲乙苯	945.1	1,2-二乙苯	1044.2	间乙基苯乙烯	1066.1
对甲乙苯	948.2	1,3-二甲基-4-乙苯	1060.8	对乙基苯乙烯	1017.2
1,3,5-三甲苯	952.5	1,4-二甲基-2-乙苯	1060.8	对烯丙基苯乙烯	1096.0
邻甲乙苯	961.5	1,2-二甲基-4-乙苯	1065.4	间烯丙基苯乙烯	1109.0
1,2,4-三甲苯	976.5	1,3-二甲基-2-乙苯	1070.0	邻烯丙基苯乙烯	1109.0
1,2,3-三甲苯	1006.7	1,2,4,5-四甲苯	1110.2		

表 13-93 烷基苯保留指数（七）[2]

柱温：130℃

I 固定液 / 化合物	Apiezon L	SE-30	I 固定液 / 化合物	Apiezon L	SE-30
苯	683	690	1,3,5-三甲基苯	1 008	1 028
甲苯	794	807	1,2,4-三甲基苯	1 030	1 052
乙基苯	881	865	1,2,3-三甲基苯	1 062	1 076
邻二甲苯	927	956	正丁基苯	1 079	1 047
间二甲苯	897	943	异丁基苯	1 031	1 012
对二甲苯	902	946	对甲基异丙基苯	1 043	1 074
正丙基苯	1 000	1 010	间二乙基苯	1 068	1 047
异丙基苯	952	931	对二乙基苯	1 083	1 055

表 13-94 烷基苯保留指数（八）[94]

固定液：Apiezon L

I 柱温/℃ / 化合物	110	120	130	140	150	160	170	180	190
苯	687.2	690.4	693.7	696.9	700.2	—	—	—	—
甲苯	795.6	798.9	802.3	805.6	809.0	812.3	—	—	
乙基苯	885.4	889.0	892.6	896.2	899.8	903.4	—	—	—
正丙基苯	—	—	981.5	985.2	988.8	992.5	996.1	—	—
正丁基苯	—	—	—	—	1090.1	1094.1	1098.2	1102.2	1106.3
正戊基苯	—	—	—	—	1186.4	1190.6	1194.8	1198.9	1203.1
正己基苯	—	-	—	—	1285.3	1289.4	1293.4	1297.8	1301.9

表 13-95 烷基苯保留指数（九）[128]

固定液：OV-101　　柱温：100°C

化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
1,3-二乙基苯	1039.2	2.65	1-甲基-3-正丁基苯	1139.4	2.65
1-甲基-3-正丙基苯	1041.8	2.65	1,2,3,4-四甲基苯	1138.3	4.40
1,4-二乙基苯	1046.6	2.95	1,4-二乙基-2-甲基苯	1142.2	5.50
1-甲基-4-正丙基苯	1046.6	2.95	正戊基苯	1143.2	3.35
正丁基苯	1048.0	2.25	1,4-二甲基-2-正丙基苯	1147.7	3.25
1,2-二乙基苯	1051.3	3.25	1,3-二甲基-4-正丙基苯	1152.0	3.30
1-甲基-2-正丙基苯	1057.2	3.55	1-甲基-2-正丁基苯	1153.0	3.35
1,4-二甲基-2-乙基苯	1066.7	2.90	1,3-二乙基-2-甲基苯	1156.8	3.90
1,3-二甲基-4-乙基苯	1068.6	3.10	1,3-二甲基-2-正丙基苯	1160.1	3.30
1,2-二甲基-4-乙基苯	1074.4	3.00	1-异丙基-3-正丙基苯	1175.3	5.45
1,3-二甲基-2-乙基苯	1080.4	3.65	1,2-二甲基-3-正丙基苯	1176.3	5.05
甲基-异丁基苯	1091.9	2.90	1,3,5-三甲基-2-乙基苯	1182.3	3.55
2-苯基-3-甲基丁烷	1091.9	2.90	1,2,5-三甲基-3-乙基苯	1183.5	2.95
1-甲基-3-仲丁基苯	1093.7	3.15	1-乙基-4-仲丁基苯	1186.4	3.10
1,2-二甲基-3-乙基苯	1093.7	3.15	1,4-二甲基-2-仲丁基苯	1190.6	2.65
1-甲基-4-仲丁基苯	1100.0	3.05	1,2,3-三甲基-5-乙基苯	1194.7	2.65
1-乙基-4-异丙基苯	1103.4	2.85	1,3-二甲基-4-仲丁基苯	1198.1	3.05
2-甲基-2-苯基丁烷	1105.6	3.80	甲基戊基苯	1202.2	2.77
1,2,4,5-四甲基苯	1106.4	3.80	1,3-二正丙基苯	1208.7	3.55
1,2,3,5-四甲基苯	1108.7	4.40	正丙基甲基苯	1210.9	2.45
异戊基苯	1111.1	3.20	1,2,4-三甲基-3-乙基苯	1214.5	4.75
1,4-二甲基-2-异丙基苯	1118.7	2.25	1,4-二正丙基苯	1220.0	3.20
1-乙基-3-正丙基苯	1124.4	2.65	1-甲基-3-正戊基苯	1234.1	3.10
1,2-二甲基-4-异丙基苯	1130.3	3.15	1-甲基-2-正戊基苯	1247.8	3.70
1,3-二乙基-5-甲基苯	1130.3	—	1-甲基萘	1273.0	8.25
1,3-二甲基-5-正丙基苯	1132.4	3.45			

表 13-96 烷基苯保留指数（十）[125]

柱温：100 ℃

化合物 \ 固定液（I）	OV-101	HP-PONA	化合物 \ 固定液（I）	OV-101	HP-PONA
1,3-二甲基苯	865.3	866.2	1,2-二甲基-4-乙基苯	1074.5	1075.8
1,4-二甲基苯	865.3	866.2	1,2,4,5-四甲基苯	1105.6	1106.5
1,2-二甲基苯	888.8	889.8	1,3-二乙基-5-甲基苯	1129.6	1130.6
异丙基苯	919.2	920.1	1,4-二乙基-2-甲基苯	1143.3	1144.2
1-甲基-3-乙基苯	954.4	955.4	1,3-二乙基-4-甲基苯	1148.7	1149.6
1-甲基-4-乙基苯	956.8	957.8	1,2-二乙基-4-甲基苯	1153.9	1154.9
1-甲基-2-乙基苯	972.5	973.6	1,3,5-三甲基-2-乙基苯	1182.9	1183.9
1,2,4-三甲基苯	986.9	987.9	1,2,5-三甲基-3-乙基苯	1184.4	1185.5
1,3-二甲基-5-乙基苯	1048.2	1049.1		1254.2	1255.1
1,4-二甲基-2-乙基苯	1066.7	1067.7		1255.2	1256.2
1,3-二甲基-4-乙基苯	1068.7	1069.6		1263.2	1264.5

表 13-97 烷基苯保留指数（十一）[110]

固定液：OV-101　　柱温：100℃

化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
异丙基苯	919.5	2.75	1,2-二甲基-3-乙基苯	1094.1	3.65
正丙基苯	949.3	2.65	1-甲基-3,5-二乙基苯	1129.8	2.40
1,3,5-三甲基苯	963.0	2.40	4-甲基-1,2-二乙基苯	1143.7	3.00
1,2,4-三甲基苯	987.3	3.10	2-甲基-1,4-二乙基苯	1149.1	3.05
仲丁基苯	1005.2	3.10	1-甲基-2,4-二乙基苯	1154.2	3.15
1-甲基-3-异丙基苯	1012.6	2.35	1,2,4-三甲基-5-乙基苯	1173.0	3.55
1-甲基-4-异丙基苯	1016.6	2.58	1,3,5-三甲基-2-乙基苯	1182.8	3.24
1-甲基-2-异丙基苯	1029.5	2.77	1,2,5-三甲基-3-乙基苯	1184.9	3.25
1-甲基-3-正丙基苯	1041.8	2.72	1,2,3-三甲基-5-乙基苯	1193.4	3.40
1-甲基-4-正丙基苯	1045.8	2.70	1,3,5-三乙基苯	1206.6	1.90
1-甲基-2-正丙基苯	1057.1	3.16	1,2,4-三乙基苯	1223.2	2.80
1,3-二甲基-5-异丙基苯	1102.8	2.14	1,2,3-三乙基苯	1245.7	3.10
1,2,4,5-四甲基苯	1106.0	3.44	1,2-二甲基-3,5-二乙基苯	1263.5	3.15
1,3-二异丙基苯	1140.8	2.02	1,2,3-三甲基苯	1015.5	3.70
1,4-二异丙基苯	1159.7	2.44	1,2,3,5-四甲基苯	1109.0	3.75
1-异丙基-3-正丙基苯	1175.7	2.32	1,4-二甲基-2-异丙基苯	1118.7	2.61
1-异丙基-4-正丙基苯	1190.1	2.71	1,3-二甲基-4-异丙基苯	1123.4	2.96
1,3-二正丙基苯	1209.2	2.60	1,2-二甲基-4-异丙基苯	1130.4	2.87
1,4-二正丙基苯	1220.7	2.97	1,3-二甲基-5-正丙基苯	1132.6	2.35
乙基苯	857.7	2.50	1,2,3,4-四甲基苯	1139.0	4.40
1,3-二甲基苯	865.8	2.45	1,4-二甲基-2-正丙基苯	1147.5	2.97
1,4-二甲基苯	865.8	—	1,3-二甲基-4-正丙基苯	1152.1	3.02
1,2-二甲基苯	888.8	2.90	1,3-二甲基-2-正丙基苯	1160.5	3.03
1-甲基-3-乙基苯	954.8	2.55	1,2-二甲基-3-正丙基苯	1176.6	3.71
1-甲基-4-乙基苯	957.1	2.54	1,2,4-三甲基-5-异丙基苯	1232.7	2.73
1-甲基-2-乙基苯	973.2	3.05	1,3,5-三甲基-2-异丙基苯	1238.5	2.65
1,3-二乙基苯	1039.5	2.44	1,2,3-三甲基-5-异丙基苯	1245.7	2.95
1,4-二乙基苯	1046.0	2.65	1,2,4-三甲基-5-正丙基苯	1251.7	3.47
1,3-二甲基-5-乙基苯	1048.5	2.40	1,3,5-三甲基-2-正丙基苯	1263.2	3.46
1,4-二甲基-2-乙基苯	1067.2	3.00	1,2,5-三甲基-3-正丙基苯	1276.6	3.18
1,3-二甲基-4-乙基苯	1069.0	3.10	1,2,3-三甲基-5-正丙基苯	1278.8	3.97
1,2-二甲基-4-乙基苯	1074.7	3.18	1,2,4-三甲基-3-正丙基苯	1297.0	4.22

表 13-98 烷基苯保留指数（十二）[123]

固定液：OV-101　柱温：100℃

保留指数 / 化合物	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	保留指数 / 化合物	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$
甲苯	765.5	0.260	1-甲基-2-乙基苯	973.2	0.305
乙苯	857.7	0.245	1,2,4-三甲基苯	987.3	0.310
1,3-二甲基苯	865.8	0.245	叔丁基苯	986.8	0.310
1,4-二甲基苯	865.8	0.250	仲丁基苯	1005.2	0.310
1,2-二甲基苯	888.8	0.290	1-甲基-3-异丙基苯	1012.7	0.235
异丙基苯	919.5	0.275	1,2,3-三甲基苯	1015.5	0.370
正丙基苯	949.3	0.265	1-甲基-4-异丙基苯	1016.5	0.263
1-甲基-3-乙基苯	954.8	0.246	1-甲基-2-异丙基苯	1029.1	0.292
1-甲基-4-乙基苯	957.1	0.254	1-甲基-3-正丙基苯	1041.9	0.272
1,3,5-三甲基苯	963.0	0.240	1,3-二乙基苯	1039.5	0.244

续表

化合物 \ 保留指数	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$
1-甲基-4-正丙基苯	1045.6	0.280
正丁基苯	1047.4	0.270
1,4-二乙基苯	1046.0	0.265
1,3-二甲基-5-乙基苯	1048.4	0.240
1,2-二乙基苯	1051.4	0.310
1-甲基-2-正丙基苯	1057.0	0.334
1,4-二甲基-2-乙基苯	1067.2	0.300
1,3-二甲基-4-乙基苯	1069.0	0.310
1,2-二甲基-4-乙基苯	1074.3	0.318
1,3-二甲基-2-乙基苯	1078.5	0.330
1,2-二甲基-3-乙基苯	1094.1	0.360
1,2,4,5-四甲基苯	1106.0	0.347
1,2,3,5-四甲基苯	1109.3	0.375
1,2,3,4-四甲基苯	1139.0	0.440
1-乙基-3-异丙基苯	1092.5	0.230
1-甲基-3-仲丁基苯	1093.5	0.281
1-乙基-2-异丙基苯	1098.2	0.314
1-甲基-4-仲丁基苯	1100.0	0.282
1-乙基-4-异丙基苯	1103.5	0.260
1,3-二甲基-5-异丙基苯	1102.8	0.214
1-甲基-2-仲丁基苯	1108.7	0.341
1,4-二甲基-2-异丙基苯	1118.7	0.252
1,3-二甲基-4-异丙基苯	1123.4	0.276
1-乙基-3-正丙基苯	1124.1	0.258
1,3-二乙基-5-甲基苯	1129.8	0.240
1,2-二甲基-4-异丙基苯	1130.4	0.287
1,3-二甲基-5-正丙基苯	1132.6	0.235
1-乙基-2-正丙基苯	1133.5	0.284
1-甲基-3-正丁基苯	1140.1	0.249
1,4-二乙基-2-甲基苯	1143.7	0.300
1-甲基-4-正丁基苯	1145.5	0.280
1,4-二甲基-2-正丙基苯	1147.5	0.297
1,3-二乙基-4-甲基苯	1149.1	0.305
1,3-二甲基-4-正丙基苯	1152.1	0.302
1-甲基-2-正丁基苯	1153.3	0.328
1,2-二乙基-4-甲基苯	1154.2	0.315
1,3-二乙基-2-甲基苯	1156.9	0.370
1,2-二甲基-4-正丙基苯	1157.9	—
1,3-二甲基-2-正丙基苯	1160.5	0.303
1,2-二乙基-3-甲基苯	1170.3	—
1,2,4-三甲基-5-乙基苯	1173.0	0.315
1,2-二甲基-3-正丙基苯	1176.5	0.371
1,3,5-三甲基-2-乙基苯	1182.8	0.324
1,2,5-三甲基-3-乙基苯	1184.3	0.329
1,2,3-三甲基-5-乙基苯	1193.2	0.340
1,2,4-三甲基-3-乙基苯	1215.1	0.431
五甲基苯	1259.9	0.435
1,2,3-三甲基-4-乙基苯	1222.4	—
1-异丙基-2-正丙基苯	1179.8	0.275
1-乙基-4-仲丁基苯	1184.6	0.310
1-异丙基-4-正丙基苯	1190.1	0.268
1,4-二甲基-2-仲丁基苯	1190.6	0.260
1,2-二甲基-4-叔丁基苯	1192.4	0.310
1,3-二甲基-4-仲丁基苯	1198.4	0.312
1,3,5-三乙基苯	1206.2	0.118
1,3-二正丙基苯	1209.2	0.260
1,2-二甲基-4-仲丁基苯	1209.7	0.285
1,4-二正丙基苯	1220.6	0.297
1-甲基-2-正戊基苯	1248.7	0.310
1,3-二甲基-4-正丁基苯	1248.8	0.280
1,2,4-三甲基-5-正丙基苯	1251.7	0.340
1,2-二甲基-4-正丁基苯	1254.0	—
1,3-二甲基-2-正丁基苯	1258.3	0.293
1,3,5-三甲基-2-正丙基苯	1263.2	0.346
1,2-二甲基-3-正丁基苯	1273.6	0.311
1,2,5-三甲基-3-正丙基苯	1276.6	0.354
1,2,3-三甲基-5-正丙基苯	1278.8	0.397
1,2,3-三甲基-4-正丙基苯	1297.0	0.422
1-乙基-3-正丁基苯	1220.6	0.250
1,3-二异丙基苯	1140.8	0.208
1,2-二异丙基苯	1150.2	0.255
1,3-二甲基-5-叔丁基苯	1151.9	0.230
1,4-二异丙基苯	1159.6	0.248
1,4-二甲基-2-叔丁基苯	1164.4	0.180
1,3-二甲基-4-叔丁基苯	1168.3	0.280
1-乙基-3-仲丁基苯	1170.5	0.272
1-异丙基-3-正丙基苯	1175.7	0.238
1-乙基-2-仲丁基苯	1177.5	—
1,3-二甲基-5-仲丁基苯	1179.4	0.227
1,2,3,4-四甲基-5-乙基苯	1344.2	—
1,2,4-三乙基苯	1222.7	0.294
1,3-二甲基-5-正丁基苯	1229.1	0.208
1-乙基-4-正丁基苯	1231.9	0.302
1,2,4-三甲基-5-异丙基苯	1232.7	0.250
1-甲基-3-正戊基苯	1235.1	0.245
1,3,5-三甲基-2-异丙基苯	1238.5	0.265
1-甲基-4-正戊基苯	1241.5	0.267
1,4-二甲基-2-正丁基苯	1243.2	0.257
1,2,3-三乙基苯	1245.7	0.310
1,2,3-三甲基-5-异丙基苯	1245.5	0.295

表 13-99　烷基苯保留指数（十三）[58]

固定液：OV-101

柱温℃	100	120	140	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	柱温℃	100	120	140	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
化合物 ＼ 保留指数	I				化合物 ＼ 保留指数	I			
苯	663.6	670.7	677.8	3.55	1,2-二乙基苯	1052.7	1058.8	1065.9	2.85
甲苯	766.4	771.5	781.5	3.78	1,2,4,5-四甲基苯	1107.2	1114.4	1121.2	3.49
乙苯	858.9	864.2	870.1	2.80	1,2,3,5-四甲基苯	1110.5	1117.5	1125.0	3.65
1,3-二甲基苯	866.6	871.1	876.6	2.49	叔戊基苯	1085.5	1093.3	1102.4	4.48
1,4-二甲基苯	867.7	872.5	878.3	2.65	异戊基苯	1112.6	1118.6	1125.3	3.18
1,2-二甲基苯	890.3	896.4	903.2	3.24	正戊基苯	1145.3	1150.9	1157.4	3.03
异丙基苯	920.4	925.6	931.8	2.84	1-甲基-4-叔丁基苯	1084.6	1091.3	1097.3	3.17
正丙基苯	949.3	954.6	960.7	2.93	1-甲基-3-丁基苯	1140.7	1145.7	1151.5	2.70
1-甲基-3-乙基苯	955.9	961.3	967.0	2.78	1-甲基-4-丁基苯	1146.1	1151.6	1158.1	3.00
1-甲基-4-乙基苯	958.2	963.2	970.1	2.98	1-甲基-2-丁基苯	1154.8	1161.2	1168.7	3.47
1-甲基-2-乙基苯	974.2	978.0	986.7	3.13	1-甲基-3-异丙基苯	1093.9	1098.4	1105.0	2.78
1,3,5-三甲基苯	963.3	967.9	973.5	2.55	1-乙基-2-异丙基苯	1099.7	1105.7	1114.3	3.00
1,2,4-三甲基苯	988.4	994.1	1001.3	3.23	1-乙基-4-异丙基苯	1104.9	1110.1	1114.3	2.60
1,2,3-三甲基苯	1015.9	1022.8	1031.2	3.83	1-乙基-3-丙基苯	1125.8	1130.8	1136.4	2.65
叔丁基苯	987.6	993.5	1000.9	3.33	1-乙基-2-丙基苯	1134.8	1140.4	1146.7	2.98
仲丁基苯	1005.7	1011.9	1019.2	3.38	1-乙基-4-丙基苯	1141.9	1146.0	1150.0	2.03
正丁基苯	1048.1	1053.6	1060.0	2.97	戊基甲基苯	1260.3	1270.4	1280.5	5.04
1-甲基-3-异丙基苯	1011.9	1018.5	1024.3	3.10	正己基苯	1243.6	1249.7	1256.2	3.15
1-甲基-4-异丙基苯	1017.8	1022.9	1028.5	2.68	1,3-二异丙基苯	1142.7	1146.8	1150.7	2.00
1-甲基-2-异丙基苯	1032.3	1038.4	1014.9	3.15	1,2-二异丙基苯	1152.4	1157.2	1162.2	2.45
1-甲基-3-丙基苯	1043.4	1048.2	1054.4	2.90	1,4-二异丙基苯	1161.6	1666.7	1171.3	2.43
1-甲基-4-丙基苯	1047.5	1952.6	1057.7	2.54	1,3,5-三乙基苯	1207.1	1211.0	1215.1	1.99
1-甲基-2-丙基苯	1059.0	1065.4	1072.9	3.48	己基甲基苯	1415.6	1428.2	1441.6	6.50
1,3-二乙基苯	1040.4	1045.3	1050.7	2.58	1,3,5-三异丙基苯	1324.9	1325.7	1326.7	0.48
1,4-二乙基苯	1047.8	1053.4	1059.3	2.85					

表 13-100　烷基苯保留指数（十四）[116]

柱温：120℃

固定液	$C_{87}H_{176}$		OV-101		固定液	$C_{87}H_{176}$		OV-101	
化合物 ＼ 保留指数	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	化合物 ＼ 保留指数	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
1,4-二甲基苯	889.7	2.95	870.9	2.50	1,3-二甲基-4-乙基苯	1096.2	4.05	1075.2	3.10
1,2-二甲基苯	913.7	3.50	895.0	3.20	1,2-二甲基-4-乙基苯	1100.0	4.00	1080.8	3.05
1-甲基-3-乙基苯	973.4	3.15	959.6	2.70	1,2-二甲基-3-乙基苯	1120.5	4.60	1101.2	3.60
1-甲基-4-乙基苯	977.4	3.80	962.2	2.54	1,2,4,5-四甲基苯	1142.1	4.50	1113.2	3.55
1-甲基-2-乙基苯	993.9	4.05	976.4	3.10	1,3-二乙基-5-甲基苯	1143.5	2.75	1134.0	2.10
1,2,4-三甲基苯	1017.4	3.65	993.0	3.10	1,2-二乙基-4-甲基苯	1159.4	3.45	1149.7	3.00
1,3-二甲基-5-乙基苯	1072.8	3.00	1052.9	2.52	1,4-二乙基-2-甲基苯	1163.8	3.40	1154.9	2.90
1,4-二甲基-2-乙基苯	1088.6	3.85	1073.1	2.95	1,3-二乙基-4-甲基苯	1176.5	3.60	1160.2	3.00

表 13-101 烷基苯保留指数（十五）[113]

柱温：100℃

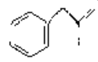
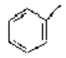
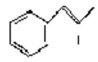
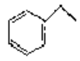
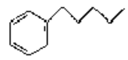
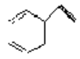
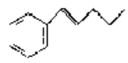
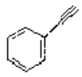
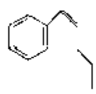
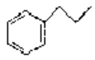
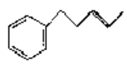
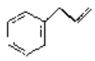
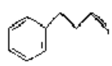
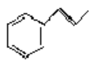
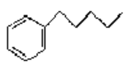
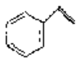
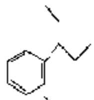
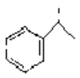
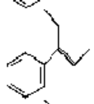
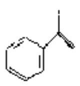
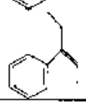
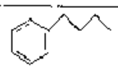
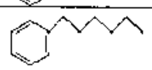
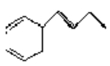
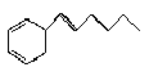
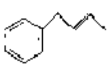
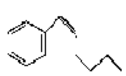
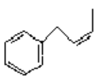
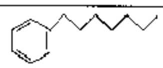
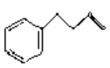
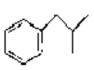
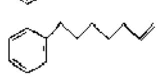
固定液	OV-1		Ucon LB 550X	固定液	OV-1		Ucon LB 550X
化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I
	663.7	2.3	759.2		1013.5	3.0	1109.0
	767.2	2.2	862.1		1070.6	3.1	1177.3
	859.1	2.3	950.3		1145.5	3.2	1233.2
	885.4	2.4	1008.7		1205.4	3.3	1323.8
	870.0	1.8	1037.0		1155.2	3.2	1258.4
	949.5	2.6	1036.6		1140.1	2.9	1246.5
	938.6	2.9	1044.1		1148.3	3.0	1253.5
	1018.8	2.8	1145.6		1140.0	3.3	1242.7
	984.1	2.5	1094.6		1082.3	3.4	1152.2
	920.5	2.5	1004.4		1134.7	3.2	
	972.6	2.6	1089.6		1087.9	3.3	
	1047.2	2.8	1134.0		1243.8	3.2	1331.5
	1112.3	3.0	1231.5		1307.8	3.3	1424.9
	1059.4	2.7	1166.2		1249.2	3.4	1353.0
	1071.0	2.8			1341.5	3.7	
	1032.0	2.9	1136.9		1405.6	3.8	
	1002.6	3.2	1083.2		1330.4	3.6	

表 13-102 烷基苯保留指数（十六）[107]

固定液：Ucon-LB-550X 柱温：90℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
正辛烷	800.0	异丙苯	1010.2	4-乙基甲苯	1056.5
正壬烷	900.0	苯乙烯	1018.7	1,3,5-三甲苯	1073.8
邻二甲苯	997.3	正丙苯	1042.5	2-乙基甲苯	1077.9
正癸烷	1000.0	3-乙基甲苯	1056.5	仲丁苯	1079.2

续表

化合物	I	化合物	I	化合物	I
异丁苯	1089.5	1-甲基-3-正丙苯	1146.2	1,3 二甲基 2-乙苯	1185.8
叔丁苯	1092.9	十氢化萘	1146.8	1-甲基茚满	1187.2
1,2,4 三甲苯	1098.2	正丁苯	1143.3	茚	1190.5
正十一烷	1100.0	茚满	1147.2	正十二烷	1200.0
α-甲基苯乙烯	1100.4	邻二乙苯	1146.9	1,2-二甲基-3-乙苯	1207.8
1-甲基-3-异丙苯	1105.2	对二乙苯	1148.2	1,2,4,5-四甲基苯	1225.2
1-甲基-4-异丙苯	1108.5	1,3-二甲基-5-乙苯	1153.0	1,2,3,5-四甲基苯	1234.3
β-甲基苯乙烯	1121.9	1-甲基-2-正丙苯	1155.2	χ-甲基茚满	1257.1
4-甲基-苯乙烯	1122.3	1,4-二甲基-2-乙苯	1168.8	1,2,3,4-四甲基苯	1270.1
1 甲基 2 异丙苯	1123.6	叔戊基苯	1169.6	3-甲基茚	1296.6
1,2,3-三甲苯	1131.5	1,3-二甲基-4-乙苯	1175.9	χ-甲基茚	1299.5
间二乙苯	1137.8	1,2-二甲基-4-乙苯	1182.1	萘	1373.8

表 13-103　烷基苯保留指数（十七）[69]

固定液：Carbowax-1540

I \ 柱温/℃ 化合物	90	100	110	120	I \ 柱温/℃ 化合物	90	100	110	120
叔丁基苯	1253.5	1259.0	1266.2	1273.3	正丁基苯	1318.9	1325.0	1332.2	1339.0
异丁基苯	1253.7	1259.4	1266.2	1273.3	1 甲基,4-正丙基苯	1310.5	1318.9	1324.4	1330.0
仲丁基苯	1260.7	1266.7	1272.5	1278.6	1,2-二乙基苯	1333.2	1342.0	1351.4	1360.3
1-甲基,3-异丙基苯	1274.9	1281.8	1289.0	1296.0	1,4 二乙基苯	1316.4	1322.8	1330.4	1337.2
1-甲基,4-异丙基苯	1277.5	1284.3	1291.5	1298.5	1,3-二甲基,5-乙基苯	1327.3	1335.2	1343.2	1351.5
1,2,3-三甲基苯	1339.8	1348.8	1357.0	1366.0	1-甲基,2-正丙基苯	1337.9	1346.6	1356.0	1364.5
1 甲基,2 异丙基苯	1309.2	1316.0	1321.9	1327.3	1,4-二甲基,2-乙基苯	1354.3	1361.9	1372.0	1378.5
1,3-二乙基苯	1307.9	1313.8	1320.4	1326.0	1,3-二甲基,4-乙基苯	1361.2	1368.7	1378.5	1385.6
1-甲基,1,3-正丙基苯	1308.3	1315.5	1322.4	1327.6	茚满	1372.5	1382.0	1392.3	1402.8

表 13-104　烷基苯保留指数（十八）[109]

固定液：Carbowax-1540

I \ 柱温/℃ 化合物	90	100	110	120	I \ 柱温/℃ 化合物	90	100	110	120
苯	960.2	965.3	971.5	977.7	1-甲基-2-异丙基苯	1308.0	1315.5	1321.9	1326.9
甲苯	1055.0	1060.8	1066.9	1073.4	1,3-二乙基苯	1308.0	1313.8	1319.7	1325.8
乙基苯	1139.0	1145.2	1151.7	1158.0	1-甲基-3-正丙基苯	1309.9	1315.5	1321.0	1327.6
对二甲苯	1148.3	1154.0	1160.5	1165.0	正丁基苯	1318.6	1325.0	1331.8	1338.6
间二甲苯	1155.4	1161.1	1166.8	1172.5	1-甲基-4-正丙基苯	1312.9	1318.9	1323.3	1330.8
邻二甲苯	1198.0	1204.5	1210.8	1216.4	1,2 二乙基苯	1334.5	1342.0	1349.5	1356.9
异丙基苯	1188.2	1193.3	1198.5	1203.8	1,4-二乙基苯	1316.6	1322.8	1320.2	1335.6
正丙基苯	1221.3	1227.3	1233.6	1240.0	1,3-二甲基-5-乙基苯	1330.2	1336.1	1342.4	1348.8
1-甲基-3-乙基苯	1241.2	1243.9	1246.6	1249.3	1-甲基-2-正丙基苯	1339.7	1346.6	1353.7	1360.4
1 甲基-4-乙基苯	1239.4	1242.0	1245.6	1249.3	1,4-二甲基-2-乙基苯	1356.4	1361.9	1368.9	1374.4
1,3,5-三甲基苯	1256.3	1261.6	1269.0	1273.6	1,3-二甲基 4-乙基苯	1361.5	1368.7	1375.9	1383.2
1 甲基 2 乙基苯	1272.0	1278.6	1285.5	1291.9	1,2-二甲基-4-乙基苯	1369.2	1376.4	1383.6	1391.0
叔丁基苯	1250.0	1254.0	1259.9	1255.3	1,3 二甲基-2-乙基苯	1384.1	1392.3	1400.0	1409.2
1,2,4-三甲基苯	1290.6	1297.9	1303.1	1311.0	1,2-二甲基-3-乙基苯	1408.6	1417.1	1425.6	1434.0
异丁基苯	1252.5	1258.2	1265.0	1272.3	茚满	1371.8	1382.6	1391.9	1400.0
仲丁基苯	1260.3	1266.7	1273.1	1278.0	1,2,4,5-四甲基苯	1418.5	1428.3	1436.6	1444.1
1-甲基-3-异丙基苯	1275.1	1281.1	1288.0	1293.4	1,2,3,5-四甲基苯	1428.3	1438.2	1446.9	1457.1
1,2,3 三甲基苯	1340.0	1348.8	1355.2	1362.3	1,2,3,4-四甲基苯	1480.5	1487.0	1498.0	1510.0
1 甲基-4-异丙基苯	1278.4	1284.4	1290.3	1296.6					

表 13-105 烷基苯保留指数（十九）[118]

固定液	角鲨烷	聚乙二醇 1540			固定液	角鲨烷	聚乙二醇 1540		
I 柱温/℃ 化合物	80	100	110	120	I 柱温/℃ 化合物	80	100	110	120
苯	648.5	969.5	965.3	971.6	1,3,5-三甲基苯	—	1255.0	1262.1	1268.7
甲苯	751.7	1057.2	1064.7	1071.3	1,2,4-三甲基苯	—	1293.3	1300.0	1306.5
乙苯	844.2	1142.9	1149.7	1156.2	仲丁基苯	—	1261.9	1268.8	1274.6
对二甲苯	858.1	1150.1	1157.3	1164.3	正丁基苯	—	1319.8	1326.7	1333.6
间二甲苯	861.1	1157.3	1164.5	1171.5	邻二乙基苯	—	1337.4	1344.0	1351.5
邻二甲苯	880.0	1200.4	1207.3	1214.2	异戊基苯	—	1385.5	1392.2	1399.0
异丙基苯	903.1	1186.5	1193.3	1200.0	叔戊基苯	—	1346.4	1353.1	1361.7
正丙基苯	—	1221.6	1228.7	1235.3					

表 13-106 烷基苯保留指数（二十）[94]

固定液：Carbowax 20M

I 柱温/℃ 化合物	100	110	120	130	140	150	160	170	180	190
苯	969.7	974.2	978.8	983.4	—	992.6	—	—	—	—
甲苯	1068.2	1073.3	1078.4	1083.4	1088.5	1093.5	—	—	—	—
乙基苯	—	1158.9	1164.3	1169.8	1175.2	1180.7	1186.1	—	—	—
正丙基苯	—	—	1245.2	1250.7	1256.1	1261.6	1267.1	1272.5	—	—
正丁基苯		—	—	—	1356.4	1362.1	1367.7	1373.3	1379.0	—
正戊基苯	—	—	—	—	—	1459.3	1464.8	1470.2	1475.7	1481.1
正己基苯	—	—	—		—	1556.1	1561.8	1567.5	1573.2	1578.9

表 13-107 烷基苯保留指数（二十一）[42]

柱温：100℃

固定液	角鲨烷		Ucon LB 550 X		Ucon HB 280 X		Carbowax 20M	
保留指数 化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
苯	650.5	3.0	759.2	1.8	821.5	3.3	947.2	5.9
甲苯	760.1	3.2	862.1	2.3	919.9	2.2	1043.2	6.3
乙苯	850.0	3.2	950.3	2.6	1007.2	2.8	1127.1	7.7
1,4-二甲基苯	864.6	3.4	960.5	2.7	1017.2	3.1	1134.8	7.8
1,3-二甲基苯	864.8	2.7	963.9	2.8	1021.7	3.1	1140.7	7.9
1,2-二甲基苯	886.0	3.4	991.6	3.1	1053.4	3.5	1183.9	9.7
异丙基苯	908.4	3.0	1004.4	2.2	1059.5	2.6	1169.8	7.3
正丙基苯	938.0	3.1	1036.6	2.6	1092.4	3.3	1205.4	8.1
1-甲基-3-乙基苯	949.7	2.5	1047.5	2.0	1105.4	3.4	1219.1	8.7
1-甲基-4-乙基苯	954.3	3.6	1047.5	2.0	1105.4	3.4	1219.1	8.7
1-甲基-2-乙基苯	966.0	2.9	1069.0	2.7	1130.7	3.8	1254.4	9.3
1,3,5-三甲基苯	969.0	2.5	1065.9	2.5	1122.8	3.5	1236.9	8.7
1,2,4-三甲基苯	987.0	2.8	1089.9	3.2	1149.8	3.6	1272.2	9.5
1,2,3-三甲基苯	1012.9	3.5	1123.2	3.5	1188.6	4.0	1320.6	9.6
叔丁基苯	971.7	2.0	1067.7	2.4	1123.1	3.1	1229.5	7.0
仲丁基苯	990.2	2.9	1085.0	3.0	1138.1	3.2	1241.7	7.1
异丁基苯	991.3	2.3	1083.8	2.9	1133.9	3.4	1235.9	5.9
1-甲基-3-异丙基苯	1009.9	2.2	1101.9	2.4	1155.6	2.9	1260.4	7.4
1,3-二乙基苯	1027.4	1.8	1225.5	2.4	1181.6	2.7	1289.4	7.3

续表

固定液 / 保留指数 / 化合物	角鲨烷		Ucon LB 550 X		Ucon HB 280 X		Carbowax 20M	
	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
正丁基苯	1036.8	2.8	1134.2	1.7	1191.8	3.0	1301.9	8.5
1-甲基-4-正丙基苯	1040.2	2.7	1131.6	3.0	1188.4	3.2	1296.0	8.5
1,4-二乙基苯	1040.5	2.7	1135.4	2.9	1190.1	3.0	1289.4	8.1
1-甲基-2-正丙基苯	1045.6	2.5	1146.5	2.0	1206.7	3.5	1321.5	8.6
1,4-二甲基-2-乙基苯	1062.2	3.2	1162.6	4.1	1220.7	3.2	1335.0	7.9
1,3-二甲基-4-乙基苯	1066.3	2.1	1168.5	3.2	1226.3	3.5	1342.8	8.7
1,2-二甲基-4-乙基苯	1072.7	3.1	1173.6	2.9	1233.5	3.5	1350.5	9.0
1,2,4,5-四甲基苯	1107.1	3.1	1214.2	3.3	1277.1	4.4	1401.3	10.4
1,2,3,5-四甲基苯	1113.1	3.3	1221.0	3.6	1284.8	4.5	1410.5	10.0
1,2,3,4-四甲基苯	1138.6	4.1	1251.9	3.8	1320.7	5.0	1456.0	11.0
仲戊基苯	1078.2	2.8	1171.5	2.6	1224.5	2.7	1321.3	7.2
1-乙基-4-正丙基苯	1126.4	2.8	1218.5	1.7	1272.5	3.9	1374.1	8.8
正戊基苯	1133.0	2.7	1233.2	3.0	1289.0	3.5	1394.1	8.2
1-甲基-4-正丁基苯	1138.8	2.0	1233.6	3.0	1288.1	2.7	1391.6	7.9
五甲基苯	1260.1	4.1	1381.7	5.2	1451.7	5.8	1591.6	10.8
1,3-二异丙基苯	1120.5	2.2	1205.5	1.8	1254.1	1.8	1342.2	5.4
1,3-二甲基-5-叔丁基苯	1150.8	1.4	1242.8	1.9	1295.0	2.0	1391.4	6.3
1,4-二异丙基苯	1154.1	2.3	1239.3	2.9	1288.9	2.8	1380.7	6.9
1-异丙基-4-正丙基苯	1181.9	2.6	1269.8	3.1	1320.3	3.4	1413.2	7.9
1,3-二正丙基苯	1195.5	2.9	1268.3	2.7	1337.1	3.2	1429.5	7.2
1,4-二正丙基苯	1212.5	3.5	1302.2	3.3	1352.8	3.6	1446.9	8.1
1-乙基-4-正丁基苯	1227.1	3.2	1318.8	3.1	1371.8	3.3	1470.3	8.3
正己基苯	1231.0	2.9	1331.5	3.0	1386.8	3.3	1489.2	8.1
1-甲基-4-正戊基苯	1236.3	2.8	1350.8	3.3	1384.8	3.4	1484.9	8.1
六甲基苯	1415.0	6.1	1550.3	6.0	1623.9	8.4	1778.0	14.6
1-正丙基-4-正丁基苯	1311.0	3.1	1402.1	3.3	1452.0	3.7	1543.8	8.4
1-乙基-4-正戊基苯	1322.1	3.1	1415.4	3.4	1468.1	3.3	1563.3	8.5
1-甲基-4-正己基苯	1333.4	3.7	1429.0	3.5	1481.9	3.8	1579.6	8.6
1,4-二叔丁基苯	1281.3	2.6	1360.2	2.9	1408.5	2.9	1495.1	7.6
1-叔丁基-4-异丁基苯	1290.6	1.9	1368.3	3.4	1412.1	3.4	1491.2	7.4
1-叔丁基-4-仲丁基苯	1290.7	2.0	1371.3	3.3	1417.9	3.2	1499.6	7.3
1,4-二仲丁基苯	1304.3	2.8	1383.8	3.6	1428.0	3.8	1509.4	5.3
1-仲丁基-4-异丁基苯	1305.8	2.6	1383.5	3.8	1425.8	3.8	1501.3	7.8
1,4-二异丁基苯	1307.7	3.8	1384.0	3.4	1425.3	3.8	1500.8	6.2
1-叔丁基-4-正丁基苯	1345.3	3.2	1428.9	3.2	1478.8	3.4	1566.5	7.7
1-仲丁基-4-正丁基苯	1358.4	3.3	1444.0	3.7	1491.5	3.8	1574.8	8.5
1-异丁基-4-正丁基苯	1359.6	3.6	1442.1	2.8	1487.9	3.6	1569.2	7.9
1,4-二正丁基苯	1410.8	2.0	1501.5	3.0	1551.5	3.3	1640.3	9.1
1-正丙基-4-正戊基苯	1418.9	1.3	1497.5	3.9	1547.5	3.6	1636.3	8.7
1-乙基-4-正己基苯	1421.1	1.4	1511.9	4.0	1566.8	3.3	1660.0	7.2
1-甲基-4-正庚基苯	1433.9	1.9	1523.2	3.0	1582.7	3.6	1697.6	7.0
1-甲基-3,5-二叔丁基苯	-	—	1594.9	3.9	1644.4	4.3	1732.0	8.0
1-乙基-4-正庚基苯	-	—	1610.2	4.0	1661.3	4.8	1757.3	7.5
1-正丙基-4-正庚基苯	—	—	1688.4	3.6	1740.1	4.9	1830.9	7.5
1,2,4,5-四异丙基苯	1406.1	3.7	1480.7	2.0	1517.6	−1.8	1569.6	−0.5

表 13-108　烷基苯保留指数（二十二）[140]

柱温：90℃

化合物　I　固定液	Ucon LB 550X	Carbowax 20M	化合物　I　固定液	Ucon LB 550X	Carbowax 20M
苯	757.6	933.4	1-甲基-3-正丙基苯	1126.9	1277.2
甲苯	861.5	1027.[illegible]	1-甲基-4-正丙基苯	1130.0	1279.9
乙基苯	948.8	1111.[illegible]	1-甲基-2-正丙基苯	1144.1	1305.4
对二甲苯	959.9	1118.6	间二乙基苯	1125.0	1275.8
间二甲苯	963.6	1124.3	邻二乙基苯	1138.8	1298.8
邻二甲苯	995.1	1164.9	对二乙基苯	1133.3	1283.6
1-甲基-3-乙基苯	1047.2	1203.3	1,3-二甲基-5-乙基苯	1143.8	1297.0
1-甲基-4-乙基苯	1047.2	1200.8	1,4-二甲基-2-乙基苯	1161.2	1321.1
1-甲基-2-乙基苯	1068.1	1235.7	1,3-二甲基-4-乙基苯	1164.8	1325.9
异丁基苯	1080.7	1215.9	1,2-二甲基-4-乙基苯	1172.1	1332.3
仲丁基苯	1084.7	1227.2	1,3-二甲基-2-乙基苯	1174.9	1347.5
叔丁基苯	1069.7	1215.1	1,2-二甲基-3-乙基苯	1194.3	1368.9
正丁基苯	1134.8	1284.0			

表 13-109　烷基苯保留指数（二十二）[121]

固定液	角鲨烷	OV 101	Ucon LB-550X	Carbowax 20M	TCEP
化合物　I　柱温/℃	100	100	100	100	80
苯	550.1	663	760	935	1127
甲苯	757.6	766	864	1032	1219
乙基苯	847.5	857	952	1117	1289
正丙基苯	936.3	947.5	1038.5	1197	1350
正丁基苯	1036.2	1046	1136	1291	1131
异丙基苯	907.5	919	1009	1164	1320
异丁基苯	989.9	1002	1083	1228	1365
仲丁基苯	990.0	1001	1089	1235	1372
叔丁基苯	973.3	986	1075	1223	1373
对二甲苯	861.9	866	963	1126	1304
间二甲苯	864.4	866	966	1130	1308
邻二甲苯	884.0	888	995	1171	1359
1-甲基-4-异丙基苯	1010.5	1016.5	1100	1254.5	1402
1-甲基-3-异丙基苯	1002.8	1010	1094	1248	1395
1-甲基-2-异丙基苯	1016.9	1031	1114	1280	1439
1-甲基-4-正丙基苯	1039.8	1046.5	1131	1287.5	1429
1-甲基-3-正丙基苯	1034	1042	1126	1284	1425
1-甲基-2-正丙基苯	1046.1	1057.5	1146	1313	1467
1-甲基-4-乙基苯	951.5	957	1049	1208.5	1371
1-甲基-3-乙基苯	948.7	955	1049	1209	1371
1-甲基-2-乙基苯	965.3	973	1071	1242.5	1414
1,4-二乙基苯	1040.7	1047	1136	1291.5	1439
1,3-二乙基苯	1028.8	1038.5	1127	1282	1427
1,2-二乙基苯	1039.3	1051	1144	1308.5	1465
1,3,5-三甲基苯	967.7	969	1064	1228	1398
1,2,4-三甲基苯	986.3	988	1088	1260	1436
正戊基苯	1135.5	1144.9	1228	1381	1505
1,2,3-三甲基苯	1012.4	1016	1121	1308	1493

表 13-110　烷基苯保留指数（二十四）[34]

固定液	角鲨烷	SE-30	柠檬酸三丁酯	固定液	角鲨烷	SE-30	柠檬酸三丁酯
化合物 \ 柱温/℃ \ I	100	65	70	化合物 \ 柱温/℃ \ I	100	65	70
苯	650.4	654.8	779.9	1-甲基-2-异丙基苯	1016.4	1016.9	1140.1
甲苯	758.0	757.6	881.1	1,3-二乙基苯	1028.9	1031.5	1149.4
乙基苯	847.1	849.1	971.2	1-甲基-3-正丙基苯	1033.4	1031.6	1149.7
对二甲苯	861.8	857.8	978.5	正丁基苯	1035.8	1037.4	1157.3
间二甲苯	863.2	857.8	981.4	1,4-二乙基苯	1039.1	1037.1	1158.0
邻二甲苯	883.7	878.9	1007.9	1-甲基-4-正丙基苯	1039.3	1035.4	1153.1
异丙基苯	908.0	910.1	1029.4	1,2-二乙基苯	1039.1	1042.7	1165.4
正丙基苯	936.1	938.1	1056.4	1-甲基-2-正丙基苯	1046.3	1045.8	1168.2
1-甲基-3-乙基苯	948.6	948.2	1068.8	1,3-二甲基-5-乙基苯	1048.2	1042.7	1165.4
1-甲基-4-乙基苯	951.3	948.2	1068.8	1,4-二甲基-2-乙基苯	1060.0	1060.5	1180.7
1-甲基-2-乙基苯	964.7	963.2	1089.8	1-甲基-3-叔丁基苯	1062.3	1067.5	1183.8
1,3,5-三甲基苯	967.6	952.1	1078.6	1,3-二甲基-4-乙基苯	1066.6	1060.5	1186.2
叔丁基苯	973.3	975.4	1095.7	叔戊基苯	1070.3	1070.5	1189.3
1,2,4-三甲基苯	988.2	974.9	1095.3	1,2-二甲基-4-乙基苯	1072.0	1066.0	1191.7
异丁基苯	989.8	993.1	1105.3	1,3-二甲基-2-乙基苯	1072.0	1070.4	1200.0
仲丁基苯	989.8	993.1	1108.4	1-甲基-4-叔丁基苯	1075.6	1072.2	1193.5
1-甲基-3-异丙基苯	1002.4	998.1	1119.0	仲戊基苯	1078.1	1082.1	1200.0
1-甲基-4-异丙基苯	1011.0	1003.2	1123.7	1,2-二甲基-3-乙基苯	1088.1	1082.5	—
1,2,3-三甲基苯	1011.9	1005.2	1134.6				

表 13-111　烷基苯保留指数（二十五）[132]

固定液：乙酰基柠檬酸三丁酯　　柱温：80℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
异丙基苯	1032.42	仲丁基苯	1112.10	1,3-二甲基-5-乙基苯	1166.87
正丙基苯	1059.99	1-异丙基-4-甲基苯	1129.57	1,4-二甲基-2-乙基苯	1182.04
1-乙基-3-甲基苯	1070.53	1-异丙基-2-甲基苯	1145.13	1,3-二甲基-4-乙基苯	1188.53
1-乙基-4-甲基苯	1071.02	1,3-二乙基苯	1151.40	1,2-二甲基-4-乙基苯	1194.04
1-乙基-2-甲基苯	1092.09	1-甲基-3-正丙基苯	1153.38	1,3-二甲基-2-乙基苯	1201.77
1,3,5-三甲基苯	1084.45	正丁基苯	1160.26	1,2-二甲基-3-乙基苯	1217.51
1,2,4-三甲基苯	1107.43	1,2-二乙基苯	1167.31	1,2,4,5-四甲基苯	1229.04
1,2,3-三甲基苯	1140.56	1-甲基-4-正丙基苯	1157.01	1,2,3,5-四甲基苯	1235.59
叔丁基苯	1099.32	1,4-二乙基苯	1160.42	1,2,3,4-四甲基苯	1266.11
异丁基苯	1108.74	1-甲基-2-正丙基苯	1171.88		

表 13-112　烷基苯保留指数（二十六）[59]

柱温：80℃

固定液	角鲨烷		乙酰基柠檬酸三丁酯		1,2,3-三(2-氰乙氧基)丙烷	
化合物 \ 保留指数	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$
苯	644.42	0.240	780.66	0.192	1128.2	1.96
甲苯	751.68	0.245	882.60	0.213	1219.1	2.03
乙基苯	841.56	0.265	973.52	0.225	1289.8	2.14
对二甲苯	855.73	0.251	980.48	0.214	1302.1	2.14
间二甲苯	857.76	0.215	983.96	0.213	1306.1	2.07

续表

固定液	角鲨烷		乙酰基柠檬酸三丁酯		1,2,3-三(2-氰乙氧基)丙烷	
化合物 \ 保留指数	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$
邻二甲苯	877.26	0.284	1010.94	0.253	1357.5	2.42
异丙基苯	901.00	0.264	1032.42	0.211	1319.5	2.11
正丙基苯	929.74	0.282	1059.99	0.245	1349.9	2.22
1-甲基-3-乙基苯	943.07	0.212	1070.53	0.213	1370.4	2.23
1-甲基-4-乙基苯	945.26	0.269	1071.02	0.207	1372.1	2.24
1-甲基-2-乙基苯	958.25	0.252	1092.09	0.268	1415.4	2.37
1,3,5-三甲基苯	962.70	0.239	1084.45	0.206	1387.9	2.20
叔丁基苯	967.08	0.290	1099.32	0.255	1372.7	2.21
1,2,4-三甲基苯	979.70	0.288	1107.43	0.264	1435.5	2.38
异丁基苯	982.35	0.301	1108.74	0.263	1363.1	2.21
仲丁基苯	983.15	0.308	1112.10	0.262	1371.7	2.21
1-甲基-3-异丙基苯	997.41	0.216	1124.76	0.180	1396.4	2.07
1,2,3-三甲基苯	1004.31	0.337	1140.56	0.312	1493.1	2.65
1-甲基-4-异丙基苯	1004.39	0.267	1129.57	0.228	1403.2	2.13
1-甲基-2-异丙基苯	1010.42	0.264	1145.13	0.224	1439.4	2.26
1,3-二乙基苯	1023.18	0.244	1151.40	0.201	1428.4	2.19
1-甲基-3-丙基苯	1027.78	0.255	1153.38	0.217	1425.0	2.21
正丁基苯	1029.42	0.281	1160.26	0.251	1431.3	2.29
1,2-二乙基苯	1032.95	0.289	1167.31	0.253	1465.4	2.36
1-甲基-4-丙基苯	1033.02	0.282	1157.01	0.246	1430.3	2.25
1,4-二乙基苯	1033.82	0.277	1160.42	0.244	1439.4	2.23
1-甲基-2-丙基苯	1039.41	0.298	1171.86	0.265	1467.5	2.37
1,3-二甲基-5-乙基苯	1043.46	0.218	1166.87	0.182	1447.8	2.18
1,4-二甲基-2-乙基苯	1054.29	0.260	1182.94	0.229	1486.9	2.32
1-甲基-3-特丁基苯	1051.12	0.236	1185.93	0.183	1444.4	2.14
1,3-二甲基-4-乙基苯	1060.40	0.231	1188.53	0.249	1492.7	2.46
叔戊基苯	1062.21	0.369	1192.72	0.330	1447.0	2.34
1,2-二甲基-4-乙基苯	1064.95	0.236	1194.04	0.253	1499.3	2.49
1,3-二甲基-2-乙基苯	1064.97	0.309	1201.77	0.287	1527.0	2.63
1-甲基-4-叔丁基苯	1069.11	0.292	1195.38	0.261	1455.4	2.11
仲戊基苯	1071.59	0.286	1200.61	0.260	1437.0	2.32
1,2-二甲基-3-乙基苯	1080.77	0.329	1217.51	0.303	1543.5	2.73
1,2,4,5-四甲基苯	1099.53	0.341	1229.04	0.298	1553.3	2.74
1,2,3,5-四甲基苯	1105.05	0.338	1235.59	0.309	1565.0	2.77
1,3-二异丙基苯	1115.13	0.195	1241.46	0.137	1458.8	1.94
正戊基苯	1128.58	0.286	1257.89	0.233	1506.4	2.37
1,2,3,4-四甲基苯	1125.98	0.395	1266.14	0.370	1618.6	3.07
1,3-二甲基-5-叔丁基苯	1116.85	0.167	1272.13	0.119	1512.9	2.05
1,4-二异丙基苯	1148.55	0.247	1274.07	0.197	1494.4	2.07
1,3,5-三乙基苯	1188.34	0.167	1314.30	0.117	1547.0	2.20
五甲基苯	1251.20	0.452	1389.91	0.432	1737.9	3.60
1,3,5-三异丙基苯	1282.82	0.015	1406.21	−0.074	1556.0	1.28

表 13-113　烷基苯保留指数（二十七）[54]

固定液	角鲨烷	乙酰基柠檬酸三正丁酯	固定液	角鲨烷	乙酰基柠檬酸三正丁酯
I　柱温/℃ 化合物	95.4	95.2	I　柱温/℃ 化合物	95.4	95.2
1-乙基-2-丙基苯	1114.7	1246.7	1-乙基-2-己基苯	1397.7	1530.4
1-甲基-2-丁基苯	1140.3	1272.0	正辛基苯	1427.3	1559.7
1,2-二丙基苯	1187.5	1317.7	1-甲基-2-庚基苯	1431.3	1564.6
1-乙基-2-丁基苯	1207.9	1340.2	1-丁基-2-戊基苯	1460.6	1591.9
正己基苯	1228.0	1359.5	1-丙基-2-己基苯	1466.8	1597.8
1-甲基-2-戊基苯	1235.3	1367.0	1-乙基-2-庚基苯	1496.1	1630.4
1-丙基-2-丁基苯	1279.3	1409.3	正壬基苯	1527.2	1660.0
1-乙基-2-戊基苯	1302.1	1434.7	1-甲基-2-辛基苯	1530.5	1664.7
4-苯基辛烷	1311.2	—	1,2-二戊基苯	1551.8	1683.5
3-苯基辛烷	1321.5	—	1-丁基-2-己基苯	1555.1	1686.5
正庚基苯	1327.7	1459.5	1-丙基-2-庚基苯	1564.3	1695.7
1-甲基-2-己基苯	1332.1	1465.0	1-己基-2-辛基苯	1595.0	1728.8
2-苯基辛烷	1357.8		正癸基苯	1626.8	1759.5
1,2-二丁基苯	1370.0	1502.2	1-甲基-2-壬基苯	1629.8	1763.9
1-丙基-2-戊基苯	1371.9	1502.2			

表 13-114　烷基苯保留指数（二十八）[215]

固定液	邻苯二甲酸二壬酯	PEG-4000	固定液	邻苯二甲酸二壬酯	PEG-4000
I　柱温/℃ 化合物	60	100	I　柱温/℃ 化合物	60	100
苯	739.1	1270	异丙基苯	1045	1942
降冰片二烯	752.5	1214	正丙基苯	1080	2050
甲苯	861.8	1540	对-甲基乙基苯	1100	2080
环庚三烯	878.8	1636	间-甲基乙基苯	1103	2072
乙基苯	973.3	1802	1,3,5-三甲基苯	1122	2162
对二甲基苯	980.4	1830	邻甲基乙基苯	1122	2193
间二甲基苯	988.1	1844	1,2,4-三甲基苯	1144	2267
邻二甲基苯	1024	1975	1,2,3-三甲基苯	1178	2428

表 13-115　苯、甲苯、二甲苯保留指数（一）[195]

柱温：100℃

I　固定液 化合物	Apiezon L①+KOH	Apiezon L①+KF	Apiezon L①+Na_3PO_4
苯	698	699	698
甲苯	798	800	800
对二甲苯	900	899	901
间二甲苯	902	902	902
邻二甲苯	926	924	925

① Apiezon L 经过加氢。

表 13-116　苯、甲苯、二甲苯保留指数（二）[110]

固定液	Apiezon L+Na_3PO_4		固定液	Apiezon L+Na_3PO_4	
I　柱温/℃ 化合物	80	130	I　柱温/℃ 化合物	80	130
苯	680	688	对二甲苯	891	901
甲苯	788	797	邻二甲苯	915	929

表 13-117　部分芳烃保留指数（一）[108]

固定液：角鲨烷

化合物 \ I \ 柱温/℃	98	化合物 \ I \ 柱温/℃	98	化合物 \ I \ 柱温/℃	98
苯	650	烯丙基苯	920	3-甲基乙基苯	947
甲苯	757	异丙基苯	907	3-甲基苯乙烯	979
乙基苯	848	α-甲基苯乙烯	960	4-甲基乙基苯	950
苯乙烯	874	2-甲基乙基苯	963	4-甲基苯乙烯	980
正丙基苯	935	2-甲基苯乙烯	974		

表 13-118　部分芳烃保留指数（二）[75]

固定液：OV-101

柱温/℃	100	120	140		柱温/℃	100	120	140	
化合物 \ 保留指数	I			$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	化合物 \ 保留指数	I			$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
苯	663.6	670.7	677.8	3.55	叔戊基苯	1085.5	1093.3	1102.1	4.18
甲苯	766.4	771.5	781.5	3.78	异戊基苯	1112.6	1118.6	1125.3	3.18
乙基苯	858.9	864.2	870.1	2.80	正戊基苯	1145.3	1150.9	1157.4	3.03
间二甲苯	866.6	871.1	876.6	2.19	1-甲基-4-叔丁基苯	1084.6	1091.3	1097.3	3.17
对二甲苯	867.7	872.5	878.3	2.65	1-甲基-3-正丁基苯	1140.7	1145.7	1151.5	2.70
邻二甲苯	890.3	896.4	903.2	3.24	1-甲基-4-正丁基苯	1146.1	1151.6	1158.1	3.00
异丙基苯	920.4	925.6	931.8	2.84	1-甲基-2-正丁基苯	1154.8	1161.2	1168.7	3.47
正丙基苯	949.3	954.6	960.7	2.93	1-乙基-3-异丙基苯	1093.9	1098.4	1105.0	2.78
1-甲基-3-乙基苯	955.9	961.3	967.0	2.78	1-乙基-2-异丙基苯	1099.7	1105.7	1114.3	3.00
1-甲基-4-乙基苯	958.2	963.2	970.1	2.98	1-乙基-4-异丙基苯	1104.9	1110.1	1114.3	2.60
1-甲基-2-乙基苯	974.2	978.0	986.7	3.13	1-乙基-3-正丙基苯	1125.8	1130.8	1136.4	2.65
1,3,5-三甲基苯	963.3	967.9	973.5	2.55	1-乙基-2-正丙基苯	1134.8	1140.4	1146.7	2.98
1,2,4-三甲基苯	988.4	994.1	1001.3	3.23	1-乙基-4-正丙基苯	1141.9	1146.0	1150.0	2.03
1,2,3-三甲基苯	1015.9	1022.8	1031.2	3.83	五甲基苯	1260.3	1270.4	1280.5	5.04
叔丁基苯	987.6	993.5	1000.9	3.33	正己基苯	1243.6	1249.7	1256.2	3.15
仲丁基苯	1005.7	1011.9	1019.2	3.38	1,3-二异丙基苯	1142.7	1146.8	1150.7	2.00
正丁基苯	1048.1	1053.6	1060.0	2.97	1,2-二异丙基苯	1152.4	1157.2	1162.2	2.45
1-甲基-3-异丙基苯	1011.9	1018.5	1024.3	3.10	1,4-二异丙基苯	1161.6	1166.7	1171.3	2.43
1-甲基-4-异丙基苯	1017.8	1022.9	1028.5	2.68	1,3,5-三乙基苯	1207.1	1211.0	1215.1	1.99
1-甲基-2-异丙基苯	1032.3	1038.4	1044.9	3.15	六甲基苯	1415.6	1428.2	1441.6	6.50
1-甲基-3-正丙基苯	1043.4	1048.2	1054.4	2.90	1,3,5-三异丙基苯	1324.9	1325.7	1326.7	0.48
1-甲基-4-正丙基苯	1047.5	1052.6	1057.7	2.54	苯乙烯	885.0	890.5	897.3	3.08
1-甲基-2-正丙基苯	1059.0	1065.4	1072.9	3.48	α-甲基苯乙烯	972.5	977.4	983.1	2.65
1,3-二乙基苯	1040.4	1045.3	1050.7	2.58	邻甲基苯乙烯	987.5	993.2	1000.4	3.23
1,4-二乙基苯	1047.9	1053.4	1059.3	2.85	间-甲基苯乙烯	985.9	991.4	997.8	2.98
1,2-二乙基苯	1052.7	1058.9	1065.9	2.85	烯丙基苯	938.9	943.6	950.5	2.90
1,2,4,5-四甲基苯	1107.2	1114.4	1121.2	3.49	2,3-二氢茚	1027.4	1036.1	1046.0	4.65
1,2,3,5-四甲基苯	1110.5	1117.5	1125.0	3.63	茚	1034.1	1043.3	1053.8	4.93

表 13-119　部分芳烃保留指数（三）[181]

固定液：SE-30

化合物 \ I \ 柱温/℃	80	130	化合物 \ I \ 柱温/℃	80	130
苯	659	670	乙基苯	854	867
甲苯	761	774	间二甲苯	864	876

续表

I 柱温/℃ 化合物	80	130	*I* 柱温/℃ 化合物	80	130
对二甲苯	864	876	对甲基苯乙烯	985	1000
邻二甲苯	885	900	反-1-苯基-1-丁烯	1105	1120
正丙基苯	944	959	4-苯基-2-丁烯	1028	1042
异丙基苯	915	929	1-苯基-2-丁烯	1052	1064
间乙基甲苯	952	967	间烯丙基甲苯	1029	1043
对乙基甲苯	954	967	对烯丙基甲苯	1033	1047
邻乙基甲苯	968	984	邻烯丙基甲苯	1041	1055
1,3,5-三甲基苯	960	972	2,6-二甲基苯乙烯	1060	1078
1,2,4-三甲基苯	984	1000	2,5-二甲基苯乙烯	1080	1096
1,2,3-三甲基苯	1009	1029	2,4-二甲基苯乙烯	1083	1100
正丁基苯	1041	1058	间乙基乙烯基苯	1066	1074
仲丁基苯	1000	1017	对乙基乙烯基苯	1073	1082
间二乙基苯	1036	1050	邻乙基乙烯基苯	—	1091
对二乙基苯	1042	1058	间二乙烯基苯	1092	1108
邻二乙基苯	1047	1064	邻二乙烯基苯	1102	
1,2,4,5-四甲基苯	1100	1118	苯基乙炔	862	875
异杜烯	1104	-	4-苯基-1-丁炔	1053	1064
苯乙烯	880	893	1-苯基-1-丁炔	1118	1129
烯丙基苯	934	948	苯基环戊烷	1196	1221
α-甲基苯乙烯	968	980	苯基环己烷	—	1314
β-甲基苯乙烯	1011	1026	苯基-1-环己烯	—	1384
邻甲基苯乙烯	982	1000	联苯	—	1359
间甲基苯乙烯	982	1000			

表 13-120　部分芳烃保留指数（四）[135]

柱温：70℃

I 固定液 化合物	SE 30	Carbowax 20M	*I* 固定液 化合物	SE-30	Carbowax 20M
苯	657.1	954.5	1,3-二甲基-4-乙基苯	1061.7	1350.0
萘	1145.0	1620.0	1,3-二甲基-5-乙基苯	1042.6	1319.8
1,2,3,4-四氢萘	1129.8	1490.4	1,4-二甲基-2-乙基苯	1059.0	1343.5
甲苯	759.9	1049.5	1,2-二乙基苯	1043.5	1324.0
邻二甲苯	882.2	1185.7	1,3-二乙基苯	1034.8	1297.3
间二甲苯	859.6	1145.3	1,4-二乙基苯	1040.1	1305.2
对二甲苯	860.8	1138.9	正丙基苯	941.8	1210.1
1,2,3-三甲基苯	1006.0	1325.4	异丙基苯	911.3	1176.9
1,2,4-三甲基苯	977.5	1277.6	1-甲基-2-丙基苯	1048.3	1327.7
1,3,5-三甲基苯	956.2	1242.2	1-甲基-3-丙基苯	1034.8	1301.0
1,2,3,4-四甲基苯	1127.5	1461.6	1-甲基-4-丙基苯	1038.1	1301.0
1,2,4,5-四甲基苯	1096.4	1406.8	1-甲基-2-异丙基苯	1020.6	1276.4
1,2,3,5-四甲基苯	1099.5	1416.5	1-甲基-3-异丙基苯	1006.6	1266.5
乙基苯	851.4	1131.9	1-甲基-4-异丙基苯	1009.5	1268.8
1-甲基-2-乙基苯	964.6	1258.4	1,2-二甲基-3-丙基苯	1166.5	1458.6
1-甲基-3-乙基苯	949.0	1224.9	1,2-二甲基-4-丙基苯	1149.5	1435.8
1-甲基-4-乙基苯	950.6	1233.4	1,3-二甲基-2-丙基苯	1152.2	1451.6
1,2-二甲基-3-乙基苯	1083.5	1394.8	1,3-二甲基-4-丙基苯	1143.7	1429.0
1,2-二甲基-4-乙基苯	1066.1	1357.2	1,3-二甲基-5-丙基苯	1126.0	1406.2
1,3-二甲基-2-乙基苯	1069.6	1372.1	1,4-二甲基-2-丙基苯	1140.0	1415.0

续表

I 固定液 / 化合物	SE-30	Carbowax 20M	I 固定液 / 化合物	SE-30	Carbowax 20M
正丁基苯	1039.6	1309.1	α 甲基苯乙烯	966.4	1320.9
异丁基苯	994.3	1241.3	顺-β-甲基苯乙烯	975.3	1324.3
仲丁基苯	997.0	1248.1	2-甲基-反-β-甲基苯乙烯	1098.3	1464.0
正戊基苯	1140.5	1404.3	1-甲基-反-β-甲基苯乙烯	1109.0	1428.7
叔丁基苯	980.0	1237.9	二戊烯	1019.8	1200.0
烯丙基苯	932.6	1263.2	茚满	1015.7	1355.9
1,3-二乙烯基苯	1091.3	1541.0	茚	1023.3	1455.8
1,4-二乙烯基苯	1100.0	1554.2	4-甲基茚满	1120.6	1467.9
乙炔基苯	862.1	1357.2	5-甲基茚满	1112.2	1446.9
4-(甲基乙炔基)苯	965.9	1454.3	反六氢茚满	949.8	1059.3
5-(甲基乙炔基)苯	960.5	1450.9	顺六氢茚满	980.9	1107.3
苯乙烯	877.8	1255.1	2-乙基降冰片烷	919.9	1020.2
2 甲基苯乙烯	977.5	1342.2	2-乙基降冰片烯	915.9	1015.1
3-甲基苯乙烯	977.0	1348.1	5-亚乙基-2-降冰片烯	908.2	1106.8
4-甲基苯乙烯	980.5	1348.6	5-乙烯基-2-降冰片烯	877.9	1067.1
2,4-二甲基苯乙烯	1075.4	1440.5	顺十氢化萘	1081.5	1223.0
2,5 二甲基苯乙烯	1078.7	1432.2	反十氢化萘	1041.7	1160.9
2,3-二甲基苯乙烯	1100.3	1485.1	四氢二环戊二烯	1077.6	1243.4
4-乙基苯乙烯	1073.2	1431.2	二环戊二烯	1011.9	1247.1
3-乙基苯乙烯	1065.8	1423.7	二氢二环戊二烯	1050.5	1252.7
反 β 甲基苯乙烯	1009.9	1390.3			

表 13-121 部分芳烃保留指数（五）[14]

固定液	SE-30	柠檬酸三丁酯	Carbowax 6000	固定液	SE-30	柠檬酸三丁酯	Carbowax 6000
I 柱温/℃ / 化合物	65	90	90	I 柱温/℃ / 化合物	65	90	90
1 甲基 4 叔丁基苯	—	—	1355.1	1,3,5-三异丙基苯	—	—	1495.2
1,2-二甲基-3-乙基苯	1082.5	1220.5	1430.8	苯乙烯	874.9	—	—
1,2,4,5-四甲基苯	1094.9	1232.1	1445.8	邻甲基苯乙烯	963.5	—	—
1,2,3,5-四甲基苯	1097.7	1238.9	1455.8	对甲基苯乙烯	977.9	-	--
1,3-二异丙基苯	1135.2	1242.7	1376.0	2,3 二氢化茚	1011.8		
正戊基苯	1135.2	1260.7	1133.3	茚	1017.5	—	—
1,2,3,4 四甲基苯	1125.6	1270.9	—	间乙基苯乙烯	1064.4	—	--
1,4-二异丙基苯	1152.0	1270.9	1417.6	对乙基苯乙烯	1072.0		
1,3-二甲基-5-叔丁基苯	1152.0	1275.0	1430.8	1,3 二乙烯基苯	1086.0	—	—
1,3,5 三乙基苯	1158.1	1314.8	1476.5	1,4 二乙烯基苯	1096.2	—	--
1,2,3,4,5-五甲基苯	—	1391.3	—	1,2,3,4-四氢化萘	1125.6	—	—

表 13-122 部分芳烃保留指数（六）[83]

固定液：Ucon LB-550X

I 柱温/℃ / 化合物	90	100	110	120	130	I 柱温/℃ / 化合物	90	100	110	120	130
苯	761.3	763.6	766.6	768.5	772.2	1,3,5-三甲基苯	1067.3	1070.1	1073.0	1075.5	1078.0
甲苯	864.4	866.9	870.0	872.2	875.4	叔丁基苯	1069.3	1072.2	1075.0	1078.3	1080.3
乙基苯	952.4	955.3	958.2	961.0	963.6	1-甲基-2-乙基苯	1070.6	1073.7	1076.6	1079.9	1082.3
对二甲苯	962.6	965.3	968.[illegible]	970.8	973.7	异丁基苯	1082.3	1085.5	1088.6	1091.8	1095.1
间二甲苯	965.9	968.7	971.4	974.3	977.1	仲丁基苯	1085.1	1088.4	1091.6	1094.7	1097.6
邻二甲苯	993.0	996.3	1000.0	1003.0	1006.7	1,2,4 三甲基苯	1090.1	1093.4	1097.8	1100.0	1104.0
异丙基苯	1006.1	1009.0	1111.8	1114.7	1118.2	苯乙烯	1017.1	1019.9	1022.5	1024.8	1026.9
正丙基苯	1038.7	1041.7	1044.6	1047.1	1049.4	烯丙基苯	1055.0	1057.1	1059.3	1061.9	1064.2
1-甲基-4-乙基苯	1050.2	1052.9	1055.6	1058.0	1059.5	α-甲基苯乙烯	1092.1	1094.6	1096.6	1098.0	1100.0
1 甲基 3 乙基苯	1050.2	1052.9	1055.6	1058.0	1059.5						

表 13-123 部分芳烃保留指数（七）[37]

固定液：角鲨烷

柱温/℃ 保留指数 化合物	86 I	96 I	∂I/∂T	柱温/℃ 保留指数 化合物	86 I	96 I	∂I/∂T
苯	648.0	650.2	0.22	1-甲基-4-叔丁基苯	1072.3	1074.7	0.24
甲苯	755.0	757.1	0.21	2,4-二甲基苯乙烯	1080.9	1084.2	0.33
苯基乙炔	830.4	834.1	0.37	1-甲基-4-仲丁基苯	1088.7	1091.0	0.23
乙苯	845.3	847.7	0.24	1-乙基-3-异丙基苯	1074.3	1076.5	0.22
对二甲苯	859.0	861.2	0.23	1-乙基-2-异丙基苯	1076.9	1079.8	0.29
间二甲苯	861.0	863.2	0.22	1-乙基-4-异丙基苯	1091.5	1097.3	0.28
邻二甲苯	880.8	883.0	0.22	异戊基苯	1094.9	1098.4	0.35
苯乙烯	872.0	874.5	0.25	顺十氢化萘	1101.4	1106.2	0.48
异丙基苯	904.1	906.7	0.26	1,2,4,5-四甲基苯	1102.8	1105.9	0.31
烯丙基苯	917.8	920.0	0.22	1,2,3,5-四甲基苯	1108.4	1111.4	0.30
正丙基苯	932.7	935.1	0.24	1,2,3,4-四甲基苯	1129.2	1132.7	0.35
1-甲基-3-乙基苯	945.9	947.4	0.15	1-乙基-3-正丙基苯	1108.4	1111.1	0.27
1-甲基-4-乙基苯	948.2	950.4	0.22	1-乙基-2-正丙基苯	1116.7	1119.2	0.25
1-甲基-2-乙基苯	961.1	963.4	0.23	1-乙基-4-正丙基苯	1121.9	1125.2	0.33
氯茚	953.6	957.1	0.35	1,3-二异丙基苯	1116.7	1118.8	0.25
α-甲基苯乙烯	957.8	960.0	0.22	1,2-二异丙基苯	1118.1	1120.3	0.22
3-甲基苯乙烯	976.3	978.7	0.24	1,4-二异丙基苯	1151.2	1153.4	0.22
4-甲基苯乙烯	978.6	980.3	0.17	1,2-二甲基茚满	1124.7	1128.8	0.41
1,3,5-三甲基苯	965.0	967.1	0.21	1,2-二氢化萘	1127.9	1133.2	0.53
1,2,4-三甲基苯	982.8	985.3	0.25	正戊基苯	1131.3	1136.2	0.49
1,2,3-三甲基苯	1007.8	1010.5	0.27	1,2,3,4-四氢化萘	1133.2	1137.6	0.44
叔丁基苯	969.9	972.5	0.26	萘	1146.0	1151.8	0.58
异丁基苯	985.5	988.3	0.28	1-乙基-4-叔丁基苯	1158.5	1161.0	0.25
仲丁基苯	986.4	989.1	0.27	1,4-二甲基-2-正丁基苯	1165.3	1167.1	0.18
二聚环戊二烯	998.8	1004.3	0.55	1,3,5-三乙基苯	1189.1	1190.8	0.17
1-甲基-3-异丙基苯	1000.3	1001.8	0.15	1,2,4-三乙基苯	1206.3	1208.0	0.17
1-甲基-4-异丙基苯	1007.7	1009.9	0.22	5-乙基茚	—	1203.6	—
1-甲基-2-异丙基苯	1013.5	1015.8	0.23	正己基苯	1225.4	1228.8	0.34
茚满	1011.2	1014.5	0.33	戊基甲基苯	1253.9	1258.6	0.47
茚	1011.8	1015.7	0.39	1-甲基萘	1264.7	1267.9	0.32
1,3-二乙基苯	1025.7	1028.1	0.24	2-甲基萘	1265.5	1271.1	0.56
1,2-二乙基苯	1034.8	1038.1	0.33	1,3,5-三异丙基苯	1285.7	1287.5	0.18
1,4-二乙基苯	1036.8	1039.3	0.25	1,2,3-三甲基环己烷(反)	853.0	853.6	0.06
正丁基苯	1032.3	1034.9	0.26	1,2,3-三甲基环己烷(顺)	869.5	870.6	0.11
1-甲基-3-正丙基苯	1030.4	1032.8	0.24	烯丙基环丙烷	921.0	922.5	0.15
1-甲基-4-正丙基苯	1035.9	1038.8	0.29	丁基环庚烷	936.4	937.1	0.07
1-甲基-2-正丙基苯	1042.0	1045.4	0.34	3-甲基壬烷	970.4	971.3	0.09
2-甲基茚	1054.1	1057.7	0.36	3-丁基环己烷	991.4	995.6	0.42
环丙基苯基甲烷	1056.4	1059.5	0.31	2-甲基癸烷	1062.3	1064.4	0.21
反十氢化萘	1064.7	1069.3	0.46	环癸烷	1128.7	1131.2	0.25
叔戊基苯	1065.9	1069.5	0.36				

表 13-124 部分芳烃保留指数（八）[36]

固定液：角鲨烷　　柱温：110℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
苯	650.3	仲丁基苯	994.1	1,3-二甲基-4-乙基苯	1069.1
甲苯	759.3	1-甲基-3-异丙基苯	1004.8	反十氢化萘	1073.9
乙苯	850.3	1-甲基-4-异丙基苯	1012.5	1,2-二甲基-3-乙基苯	1090.0
对二甲苯	865.1	1,2,3-三甲基苯	1016.4	1,2,4,5-四甲基苯	1110.7
间二甲苯	868.1	茚满	1019.4	顺十氢化萘	1112.9
邻二甲苯	888.4	1-甲基-2-异丙基苯	1023.6	1,2,3,5-四甲基苯	1116.3
异丙基苯	909.7	1,3-二乙基苯	1030.7	1-乙基-2-正丙基苯	1121.4
正丙基苯	939.0	1-甲基-3-正丙基苯	1036.1	1,3-二异丙基苯	1122.5
1-甲基-4-乙基苯	953.5	正丁基苯	1038.0	4-甲基茚满	1129.9
1-甲基-2-乙基苯	969.3	1,4-+1,2-二乙基苯+1-甲基-正丙基苯	1042.0	正丙基苯+1,2,3,4-四甲基苯	1138.8
1,3,5-三甲基苯	972.2	1-甲基-2-正丙基苯	1049.3	萘满	1142.2
叔丁基苯	976.1	1,3-二甲基-5-乙基苯	1051.0	1-甲基-2-正丁基苯	1148.1
1,2,4-三甲基苯	992.7	1,4-二甲基-2-乙基苯	1062.4	1,4-二异丙基苯	1156.9
异丁基苯	993.4	1-甲基茚满	1067.1	萘	1161.2

表 13-125 部分芳烃保留指数（九）[36]

固定液：角鲨烷　　柱温：130℃

化合物	I	化合物	I
异丁基苯+仲丁基苯	998.5	1,4-二异丙基苯	1161.8
1-甲基-3-异丙基苯	1010.2	萘	1172.8
1-甲基-4-异丙基苯	1018.0	1,3,5-三甲基-2-乙基苯+1-乙基-4-叔丁基苯+1,2,7-三甲基-5-乙基苯	1180.7
1-甲基-2-异丙基苯	1028.7	1-甲基-4-(1,1-二甲基丙基)苯	1191.8
1,3-二乙基苯	1035.8	2,4-二甲基-4-叔丁基苯	1194.8
1-甲基-3-正丙基苯	1041.1	1,3,5-三乙基苯	1197.7
正丁基苯	1044.6	1,2,4-三甲基-3-乙基苯+1-乙基-1-苯基苯	1201.1
1,2-+1,4-二乙基苯+1-甲基-4-正丙基苯	1047.9	1-甲基-3,5-二异丙基苯	1206.3
1-甲基-2-正丙基苯	1055.1	2,4-二甲基-3-苯基苯	1212.3
1,4-二甲基-2-乙基苯	1063.1	1-甲基-4-正丙基苯+1-苯基己烷	1219.8
1,3-二甲基-4-乙基苯	1075.3	2,4-二甲基-1-苯基戊烷	1246.5
反十氢化萘	1083.9	2-甲基萘	1279.5
2-甲基-2-苯基苯+1-甲基-4-仲丁基苯	1088.1	2-苯基庚烷	1281.4
1,2-二甲基-3-甲基苯	1099.3	五甲基苯	1282.7
1,3-二甲基-5-异丙基苯	1104.9	1-甲基萘	1294.1
1,2,4,5-四甲基苯	1116.9	2-乙基萘	1336.3
1,2,3,5-四甲基苯	1122.5	1-乙基萘	1337.1
顺十氢化萘	1122.9	1,2+2,7-二甲基萘	1371.5
1,2-+1,3-二异丙基苯+1-乙基-2-正丙基苯	1126.6	1,3-二甲基萘	1385.0
正丙基苯+1,2,3,4-四甲基苯+1-乙基-3-叔丁基苯	1142.1	1,6-二甲基萘	1386.9
1-甲基-2-正丁基苯	1153.3	1,4-二甲基萘	1397.4
萘满	1155.2	1,5-+2,3-二甲基萘	1399.5
1,3-二甲基-叔丁基苯	1159.7		

表 13-126 部分芳烃保留指数（十）[93]

柱温：70℃

固定液	SE-30		PEG-20M	
保留指数 / 化合物	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$
苯	657.1	0.20	954.5	0.29
甲苯	759.9	0.20	1049.5	0.35
乙基苯	851.4	0.21	1131.9	0.17
间二甲苯	859.6	0.20	1145.3	0.46
对二甲苯	860.8	0.22	1138.9	0.49
乙炔基苯	862.1	0.12	1357.2	0.17
5-乙烯基-2-降冰片烯(桥)	877.9	0.30	1067.1	0.58
苯乙烯	877.8	0.23	1255.1	0.47
邻二甲苯	882.2	0.26	1185.7	0.57
5-亚乙基-2-降冰片烯	908.2	0.22	1106.8	0.45
2-乙基降冰片烯	915.9	0.33	1015.1	-
2-乙基降冰片烯(桥?)	919.9	0.39	1020.2	0.52
异丙基苯	911.3	0.24	1176.9	0.47
烯丙基苯	932.6	0.31	1263.2	0.49
正丙基苯	941.8	0.25	1210.1	0.52
1-甲基-3-乙基苯	949.0	0.24	1224.9	0.55
1-甲基-4-乙基苯	950.6	0.25	1223.4	0.53
反六茚满	949.8	0.45	1059.3	0.76
1,3,5-三甲基苯	956.2	0.23	1242.2	0.57
3-甲基乙炔基苯	960.5	0.21	1450.9	0.36
1-甲基-2-乙基苯	964.6	0.29	1258.4	0.55
α-甲基苯乙烯	966.4	0.30	1320.9	0.61
4-甲基乙炔基苯	965.9	0.23	1454.3	0.35
顺-β-甲基苯乙烯	975.3	0.24	1324.3	0.51
3-甲基苯乙烯	977.0	0.26	1348.1	0.62
2-甲基苯乙烯	977.5	0.26	1342.2	0.68
1,2,4-三甲基苯	977.5	0.28	1277.6	0.57
叔丁基苯	980.0	0.30	1237.5	0.51
顺六茚满	980.9	0.50	1107.3	0.85
4-甲基苯乙烯	980.5	0.33	1318.6	0.63
异丁基苯	994.3	0.28	1241.3	0.52
仲丁基苯	997.0	0.30	1248.1	0.55
1,2,3-三甲基苯	1006.0	0.39	1325.4	0.72
1-甲基-3-异丙基苯	1006.6	0.22	1266.5	0.46
1-甲基-4-异丙基苯	1009.5	0.25	1268.8	0.50
反-β-甲基苯乙烯	1009.0	0.29	1390.3	0.58
二环戊二烯(桥)	1011.9	0.48	1247.1	0.90
茚满	1015.7	0.46	1355.9	0.82
二戊烯	1019.8	0.31	1200.0	0.54
1-甲基-2-异丙基苯	1020.6	0.26	1276.4	0.62
茚	1023.3	0.46	1455.8	0.85
1,3-二乙基苯	1034.8	0.31	1297.3	0.54
1-甲基-3-丙基苯	1034.8	0.28	1301.0	0.45
1-甲基-4-丙基苯	1038.1	0.30	1301.0	0.49
正丁基苯	1039.6	0.26	1309.1	0.50
1,4-二乙基苯	1040.0	0.30	1305.2	0.56
反十氢化萘	1041.7	0.55	1160.9	0.95
1,3-二甲基-5-乙基苯	1042.6	0.25	1319.8	0.50
1,2-二乙基苯	1043.5	0.32	1324.0	0.58
1-甲基-2-丙基苯	1048.3	0.33	1327.7	0.49
二氢二环戊二烯	1050.5	0.54	1252.7	0.99
1,4-二甲基-2-乙基苯	1059.0	0.32	1343.5	0.60
1,3-二甲基-4-乙基苯	1061.7	0.32	1350.0	0.61
3-乙基苯乙烯	1065.8	0.29	1423.7	0.52
1,2-二甲基-4-乙基苯	1066.1	0.31	1357.2	0.65
1,3-二甲基-2-乙基苯	1069.6	0.33	1372.1	0.67
4-乙基苯乙烯	1073.2	0.33	1431.3	0.60
2,4-二甲基苯乙烯	1075.4	0.20	1440.5	0.65
四氢二环戊二烯	1077.6	0.62	1243.4	1.00
2,5-二甲基苯乙烯	1078.7	0.29	1432.2	0.59
顺十氢化萘	1081.5	0.61	1223.0	1.03
1,2-二甲基-3-乙基苯	1083.5	0.37	1354.8	0.69
1,3-二乙烯基苯	1091.3	0.32	1541.0	0.55
1,2,4,5-四甲基苯	1096.4	0.38	1406.8	0.72
2-甲基-反-β-甲基苯乙烯	1098.3		1164.0	0.72
1,2,3,5-四甲基苯	1099.5	0.40	1416.5	0.68
1,4-二乙烯基苯	1100.0	0.33	1554.2	0.60
2,3-二甲基苯乙烯	1100.3	0.35	1485.1	0.71
4-甲基-反-β-甲基苯乙烯	1109.0	0.40	1428.7	0.66
5-甲基茚满	1112.2	0.43	1446.9	0.97
4-甲基茚满	1120.6	0.46	1467.9	1.04
1,3-二甲基-5-丙基苯	1126.0	0.21	1406.2	-
1,2,3,4-四甲基苯	1127.5	0.55	1461.6	0.72
1,2,3,4-四氢化萘	1129.8	0.49	1490.4	0.89
1,4-二甲基-2-丙基苯	1140.0	0.26	1415.0	—
正戊基苯	1140.5	0.36	1404.3	0.46
1,3-二甲基-4-丙基苯	1143.7	0.28	1429.0	—
1,2-二甲基-4-丙基苯	1149.5	—	1435.8	-
萘	1145.0	0.65	1620.0	1.15
1,3-二甲基-2-丙基苯	1152.2	0.27	1451.6	—
1,2-二甲基-3-丙基苯	1166.5	0.32	1458.6	-

表 13-127 部分芳烃保留指数（十一）[41]

固定液：四氯苯二甲酸二正丁酯

柱温/℃ 保留指数 化合物	50	100	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	柱温/℃ 保留指数 化合物	50	100	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
	I				I		
苯	774.3	782.9	1.72	1,3-二乙基苯	1126.1	1136.4	2.06
甲苯	886.0	893.0	1.40	1,4-二乙基苯	1138.7	1148.3	1.92
乙苯	962.0	971.8	1.96	1-乙基-3,4-二甲基苯	1189.5	1197.0	1.50
1,2-二甲基苯	1027.0	1033.3	1.26	1-乙基-2,4-二甲基苯	1186.9	1193.5	1.32
1,3-二甲基苯	989.5	995.0	1.10	1-乙基-3,5-二甲基苯	1146.9	1152.0	1.02
1,4-二甲基苯	995.4	1000.5	1.02	1-乙基-2,5-二甲基苯	1187.0	1192.0	1.00
正丙基苯	1043.0	1055.0	2.40	1,2,3,4-四甲基苯	1308.2	1312.3	0.82
异丙基苯	1008.1	1020.0	2.38	1,2,3,5-四甲基苯	1259.1	1262.6	0.70
1-乙基-2-甲基苯	1092.2	1101.3	1.82	1,2,4,5-四甲基苯	1257.5	1260.1	0.52
1-乙基-3-甲基苯	1058.5	1067.0	1.70	正戊基苯	1241.0	1252.5	2.30
1-乙基-4-甲基苯	1063.9	1073.7	1.96	反十氢化萘	1088.6	1117.3	5.74
1,2,3-三甲基苯	1168.2	1174.9	1.34	顺十氢化萘	1124.6	1155.0	6.08
1,2,4-三甲基苯	1128.6	1132.5	0.78	反(1,2)八氢化萘	1125.8	1152.4	5.32
1,3,5-三甲基苯	1084.7	1088.0	0.66	反(2,3)-八氢化萘	1145.0	1170.6	5.12
正丁基苯	1142.9	1154.8	2.38	(1,9)八氢化萘	1130.6	1157.7	5.42
叔丁基苯	1068.6	1083.5	2.98	萘满	1274.0	1295.8	4.36
1-正丙基-4-甲基苯	1144.7	1154.7	2.00	顺四氢化茚	1010.9	1036.3	5.08
1-异丙基-4-甲基苯	1104.1	1115.7	2.32	茚满	1152.8	1167.5	2.94
1,2-二乙基苯	1134.1	1143.1	1.80				

表 13-128 部分芳烃保留指数（十二）[42]

固定液	角鲨烷	聚乙二醇 400				固定液	角鲨烷	聚乙二醇 400			
柱温/℃	92	60	72	82	$\frac{\partial I}{\partial T}$	柱温/℃	92	60	72	82	$\frac{\partial I}{\partial T}$
保留指数 化合物	I					保留指数 化合物	I				
正己烷	600	600	600	600	-	1-甲基-3-正丙苯	1033	1299	1311	1320	0.91
苯	650	968	977	985	0.77	正丁苯	1035	1308	1319	1331	1.05
正庚烷	700	700	700	700	—	1-甲基-4-正丙苯	1039	1300	1312	1323	1.05
甲苯	758	1061	1073	1079	0.82	1,4-二乙苯	1039	1305	1317	1328	1.05
正辛烷	800	800	800	800		1,2-二乙苯	1309	1324	1337	1349	1.11
乙苯	847	1140	1150	1160	0.9	1-甲基-2-正丙苯	1045	1329	1342	1353	1.09
1,4-二甲基苯	861	1147	1158	1167	0.91	1,3-二甲基-5-乙苯	1048	1317	1329	1339	1.00
1,3-二甲基苯	863	1153	1164	1173	0.86	2-甲基吲哚	1056	1368	1386	1398	1.36
1,2-二甲基苯	883	1191	1208	1217	1.05	1,4-二甲基-2-乙苯	1060	1342	1357	1368	1.18
正壬烷	900	900	900	900	—	1-甲基吲哚	1063	138	1397	1412	1.41
异丙苯	907	1184	1194	1202	0.81	1,3-二甲基-4-乙苯	1066	1348	1363	1374	1.18
正丙苯	935	1215	1226	1236	0.95	1,2-二甲基-4-乙苯	1070	1355	1371	1382	1.23
1-甲基-3-乙苯	948	1230	1240	1249	0.86	1,3-二甲基-2-乙苯	1071	1372	1388	1399	1.23
1-甲基-4-乙苯	950	1228	1239	1249	0.95	1,2-二甲基-3-乙苯	1087	1392	1408	1420	1.27
1-甲基-2-乙苯	964	1263	1276	1285	1.00	正十一烷	1100	1100	1100	1100	—
1,3,5-三甲苯	968	1245	1257	1265	0.91	1,2,4,5-四甲苯	1106	1402	1418	1430	1.27
叔丁基苯	973	1242	1253	1262	0.91	1,2,3,5-四甲苯	1111	1412	1427	1440	1.27
1,2,4-三甲苯	986	1280	1293	1302	1.00	5-甲基吲哚	1119	1443	1460	1475	1.45
仲丁基苯	989	1251	1262	1279	0.86	4-甲基吲哚	1126	1465	1483	1497	1.45
异丁基苯	989	1242	1253	1262	0.91	1,2,3,4-四甲苯	1135	1457	1473	1487	1.36
正癸烷	1000	1000	1000	1000	—	四氢萘	1137	1486	1504	1519	1.50
1-甲基-3-异丙苯	1002	1268	1278	1289	0.95	萘	1152	1593	1642	1683	1.10
1-甲基-4-异丙苯	1010	1270	1280	1290	0.91	正十二烷	1200	1200	1200	1200	
1,2,3-三甲苯	1011	1329	1344	1357	1.27	正十三烷	1300	1300	1300	1300	—
吲哚	1011	1357	1376	1389	1.45	正十四烷	1400	1400	1400	1400	—
1-甲基-2-异丙苯	1015	1299	1311	1329	0.91	正十五烷	1500	1500	1500	1500	—
1,3-二乙苯	1028	1297	1308	1319	[illegible]						

表 13-129 烷基萘保留指数（一）[32]

固定液：Apiezon L

I 柱温/℃ 化合物	150	165	180	I 柱温/℃ 化合物	150	165	180
萘	1260.9	1273.2	1286.8	1,3-二甲基萘	1491.3	1504.1	1518.[illegible]
2-甲基萘	1367.8	1379.9	1393.8	1,6-二甲基萘	1491.9	1504.7	1519.[illegible]
1-甲基萘	1387.2	1400.0	1414.2	2,3-二甲基萘	1505.6	1519.9	1535.0
2-甲基联苯	1421.7	1431.5	1443.3	1,4-二甲基萘	1510.5	1523.9	1530.1
联苯	1426.6	1437.9	1450.9	1,5-二甲基萘	1513.6	1527.0	1542.3
2-乙基萘	1453.0	1455.3	1470.2	1,2-二甲基萘	1522.1	1535.9	1551.1
1-乙基萘	1456.1	1458.6	1482.4	3-甲基联苯	1526.0	1537.0	1549.5
二苯基甲烷	1459.1	1469.6	1482.4	4-甲基联苯	1538.3	1549.7	1562.7
2,6-二甲基萘	1472.9	1485.0	1499.0	1,8-二甲基萘	1548.0	1562.5	1578.4
2,7-二甲基萘	1472.9	1485.0	1499.0	苊	1549.4	1561.9	1582.4
1,7-二甲基萘	1482.0	1494.6	1508.8				

表 13-130 烷基萘保留指数（二）[65]

固定液：Apiezon L　　柱温：180℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
萘	1290.0	1-乙基萘	1484.5	1,4-二甲基萘	1541.0
2-甲基萘	1398.2	2,6；2,7-二甲基萘	1501.5	1,5-二甲基萘	1543.5
1-甲基萘	1418.0	1,7-二甲基萘	1511.5	1,2-二甲基萘	1554.0
联苯	1455.0	1,3+1,6-二甲基萘	1522.0	4-甲基联苯	1565.0
2-乙基萘	1482.0	2,3-二甲基萘	1538.5	1,8-二甲联萘	1579.0

表 13-131 烷基萘保留指数（三）[81]

固定液：SE-30

I 柱温/℃ 化合物	80	100	130	150	I 柱温/℃ 化合物	80	100	130	150
2-甲基萘	1252	1265	1286	1300	1,4-二甲基萘		—	1418	1431
1-甲基萘	1268	1281	1303	1318	2,3-二甲基萘	1381	1395	1419	1433
2-乙基萘	1328	1310	1358	1370	2,6-二甲基萘	-	—	1387	1399
1-乙基萘	1343	1357	1379	1393	2,7-二甲基萘	-	—	1389	1400
1,2-二甲基萘	—		1430	1447	2-乙烯基萘	—	—	1405	1418
1,3-二甲基萘	—		1400	1411	2,3,6-三甲基萘	--	—	1515	1533

表 13-132 烷基萘保留指数（四）[113]

固定液	OV-225		SE-54		固定液	OV-225		SE-54	
柱温/℃	140	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	100	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	柱温/℃	140	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	100	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
保留指数 化合物	I		I		保留指数 化合物	I		I	
萘	1565.4①	1.35	1193.9	0.64	2,7-二甲基萘	1797.3	1.43	1397.7	0.72
2-甲基萘	1682.3②	1.42	1296.4	0.70	1,4-二甲基萘	1848.4	1.70	1427.1	0.80
1-甲基萘	1707.6②	1.53	1311.7	0.72	2,3-二甲基萘	1855.0	1.63	1127.5	0.78
2-乙基萘	1787.1	1.45	1387.6	0.70	1,5-二甲基萘	1854.5	1.71	1430.2	0.80
1-乙基萘	1796.9	1.52	1390.1	0.71	联苯	1792.3	1.34	1375.4	0.61
2,6-二甲基萘	1798.6	1.50	1396.9	0.72					

① 柱温 120℃。

② 柱温 130℃。

表 13-133 丙基萘保留指数[6]

柱温：150℃

固定液 化合物	OV-1	OV-7	OV-11	OV-17	OV-22	OV-25
1-异丙基萘	1413		1596	—		1737
2-异丙基萘	1442	-	1582	—	1571	1713
1-正丙基萘	1463	1552	1618	1660	1717	1756
2-正丙基萘	1470	1553	1616	1664	1711	1748

表 13-134 烷基萘与甲基薁的保留指数[6]

柱温：130℃

固定液	OV-1	Ucon LB 550X		Ucon 50HB 280X	
保留指数 化合物	I	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
萘	1183.7	1361.0	7.7	1468.2	8.5
1-甲基萘	1301.7	1483.0	7.5	1592.5	7.5
2-甲基萘	1286.8	1463.9	7.2	1568.0	9.1
1-乙基萘	1379.2	1552.2	8.0	1658.6	8.3
2-乙基萘	1377.4	1552.2	8.0	1655.0	7.8
1-正丙基萘	1460.2	1621.2	8.9	1728.8	8.3
2-正丙基萘	1465.2	1631.8	7.9	1734.8	8.0
2-异丙基萘	1434.8	1599.3	6.1	1701.2	6.7
1-正丁基萘	1555.2	1719.7	7.7	1825.0	7.2
2-正丁基萘	1564.1	1731.8	7.1	1835.0	8.1
1-异丁基萘	1500.8	1653.5	7.6	1753.1	8.6
2-异丁基萘	1512.6	1669.3	8.1	1769.8	8.5
2-仲丁基萘	1520.7	1674.6	7.6	1776.1	8.0
2-叔丁基萘	1502.0	1655.8	7.5	1757.5	8.5
2,6-二甲基萘	1388.2	1563.4	7.0	1668.1	7.8
2,7-二甲基萘	1390.1	1566.6	7.6	1670.4	8.9
1,3-二甲基萘	1402.3	1591.2	7.6	1691.8	8.6
1,6-二甲基萘	1402.2	1590.8	7.7	1691.2	8.5
1,7-二甲基萘	1409.5	—	—	1699.8	—
1,4-二甲基萘	1419.0	1607.3	8.1	1711.7	9.6
2,3-二甲基萘	1419.6	1603.8	7.3	1712.8	8.9
1,5-二甲基萘	1420.7	1603.8	7.2	1713.1	9.5
1,2-二甲基萘	1432.0	1617.5	8.6	1729.1	9.9
1,8-二甲基萘	1449.1	1641.8	8.4	1756.8	10.1
1,3,7-三甲基萘	1500.8	1680.3	7.5	1781.6	8.7
2,3,6-三甲基萘	1522.0	1702.9	7.3	1809.8	8.9
2,3,5-三甲基萘	1533.4	1718.8	7.3	1827.4	8.3
薁	1295.9	1501.0	8.2	1621.0	9.5
1-甲基薁	1401.1	1603.0	10.1	1723.8	10.9
5-甲基薁	1400.0	1605.5	9.4	1726.3	10.0
6-甲基薁	1409.7	1616.3	9.9	1739.6	10.1
1,6,8-三甲基薁	1637.6	1853.1	11.7	1986.3	10.6

表 13-135 多环芳烃保留指数（Ⅰ）[6]

柱温：270℃

固定液 化合物	OV-101	OV-17	PFMS-6
萘	1255	1499	1566
1-甲基萘	1380	1628	1677
2-甲基萘	1351	1595	1657
苊	1550	1833	—
芴	1645	1935	2001
菲	1836	2171	2248
蒽	1846	2179	2252
3-甲基菲	1938	2265	
2-甲基菲	1945	2274	-
2-甲基蒽	1955	2281	
1-甲基蒽	1959	2308	—
1-甲基菲	1959	2302	—
1-甲基蒽	1966	2297	
9-甲基蒽	1999	2351	
荧蒽	2091	2462	-
芘	2139	2520	2714
1-甲基芘	2273	2665	—
苯并[c]菲	2464	2881	
苯并[ghi]荧蒽	2473	2881	—
苯并[a]蒽	2516	2935	3045
䓛	2526	2956	3079
环苯	2525	2953	3068
并四苯	—		3092
12-甲基苯并[a]蒽	2631	3092	
7-甲基苯并[a]蒽	2669	3116	—
苯并[b]荧蒽	2795	3244	—
苯并[k]荧蒽	2802	3256	
苯并[j]荧蒽	2796	3258	—
苯并[e]芘	2858	3339	2455
苯并[a]芘	2870	3353	3471
苝	2888	3383	3505
二苯并[a,j]蒽	3112	3610	—
茚并[1,2,3-cd]芘	3131	3610	—
二苯并[a,h]蒽	3137	3597	3773
二苯并[a,c]蒽	3142	3601	3776
苯并[b]䓛	3159	3632	—
苉	3159	3640	—
苯并[ghi]苝	3185	3656	
二苯并[cd,jk]芘	3215	3695	
晕苯	3498	3665	—
1,2,4,5-二苯并芘	3507	3971	-
1,2,6,7-二苯并芘	3508	3985	-
3,4,9,10-二苯并芘	3526	4002	
3,4,8,9-二苯并芘	3537	4002.7	—

表 13-136 多环芳烃保留指数（二）

固定液：OV-101

柱温/°C 化合物	110	160	180	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	柱温/°C 化合物	110	160	180	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
	I					I			
反十氢化萘	1082.5	-	1106.1	5.98	4-甲基联苯	1472.7	1481.5	1500.2	6.86
顺十氢化萘	1121.8	1137.7	1152.2	6.86	联苯甲烷	1412.4	1129.4	1436.8	6.10
1,2,3,4-四氢化萘	1168.7	1179.8	1194.0	6.33	1,2-联苯乙烷	1496.7	1509.3	1524.9	7.05
1,2-二氢化萘	1171.4	1183.2	1197.8	6.60	苊	1463.9	·	1501.1	9.30
萘	1191.0	1203.8	1217.3	6.58	芴	1552.1	-	1591.3	9.80
2-甲基萘	1293.9	1307.2	1323.5	7.40	菲	1719.6	--	1767.1	11.90
1-甲基萘	1309.0	1322.9	1340.2	7.80	蒽	1729.0	—	1776.5	11.90
2-乙基萘	1381.9	1398.1	1413.8	7.23	二环戊二烯	1047.3	—		-
2,6-二甲基萘	1395.6	1408.8	1424.3	7.18	苯并[b]呋喃	1005.8			—
1,7-二甲基萘	1409.0	1422.4	1438.7	7.42	苯并[b]噻吩	1196.0		1223.3	6.80
1,4-二甲基萘	1425.9	1441.1	1459.1	8.30	喹啉	1247.7	·	—	
2,3-二甲基萘	1427.3	1441.7	1459.1	7.95	异喹啉	1272.9		--	
1,2-二甲基萘	1439.7	1455.1	1473.7	8.52	吲哚	1281.1	—	1298.3	4.30
1,8-二甲基萘	1456.8	1472.1	1491.5	8.66	二苯并呋喃	1491.9	—	1531.1	9.00
2,3,6-三甲基萘	1529.1	1544.1	1561.6	8.05	二苯并噻吩	1694.3		1739.8	11.20
联苯	1366.3	1377.9	1392.0	6.44	咔唑	1761.1	—	1803.6	10.62
3-甲基联苯	1464.4	1475.6	1489.2	6.21					

表 13-137 多环芳烃保留指数（三）

固定液	PS 179		SE 30		OV-17		聚苯醚六环		Carbowax 20M	
化合物	柱温/°C	I	柱温/°C	I	柱温/°C	I	柱温/°C	I	柱温/°C	I
萘	220	1968	200	1250	230	1199	220	1586	220	1811
2-甲基萘	220	2071	220	1356	250	1595	220	1689	220	2011
1-甲基萘	220	2118	220	1375	230	1628	220	1719	220	1979
联苯	220	2179	220	1420	230	1628	220	1783	220	2056
苊	220	2391	220	1515	230	1833	220	1929	220	2216
苊烯	220	2418	220	1511	230	1808	220	1919	220	2259
二苯并呋喃	220	2161	220	1573	230	1859	—		220	2308
芴	240	2539	240	1659	230	1935	—	—	220	2371
菲	240	3008	240	1850	230	2171		—	—	
蒽	240	3023	240	1863	230	2179		—		
荧蒽	260	3558	240	2110	230	2162	—		—	
芘	260	3668	240	2162	230	2529	—		—	—
1,2-苯并芴	280	3855	240	2249	230	2607	-		—	
2,3-苯并芴	280	3870	240	2254	230	2623		—	-	
1,2-苯并蒽	280	4261	240	2148		—		-	-	
䓛	280	4294	260	2501			—			—
三亚苯	280	4299	260	2495	—	—		—	-	
苯并[a]芘	300	5000	260	2844	—	—		—	—	
苝	300	5120	260	2850	—			—		

表 13-138 多环芳烃保留指数（四）[5]

固定液：SE-30

柱温/℃ 化合物 I	80	130	150	175	200	柱温/℃ 化合物 I	80	130	150	175	200
茚满	1018	1043	1052	—		苊烯			—	-	1491
茚	1023	1019	1039		—	1,2,3,4,5,6,7,8-八氢化菲	—	1668	—	1716	1744
2-甲基茚	1124	1151	—			1,2,3,4,5,6,7,8-八氢化蒽	-	1645	—	1689	1713
萘满	1137	1164	1178	-		9,10-二氢化菲		1623	—	1668	1693
异萘满	1179	1205	1217		—	9,10-二氢化蒽	—	1622	-	1667	1692
1,2-二氢化萘	1137	1165	—			菲	—	1701		1761	1791
萘	1152	1183	1197	—		蒽	—	1713	—	1769	1800
芴		1535	—	1585	1612						
苊			—	—	1522						

表 13-139 多环芳烃保留指数（五）[44]

柱温：230℃

固定液 化合物 I	OV-101	OV-17	固定液 化合物 I	OV-101	OV-17
正十二烷	1200	1200	4-甲基菲	1959	2308
萘	1255	1199	9-甲基菲	1959	2302
2-甲基萘	1354	1595	4,5-二甲基菲	1963	2314
1-甲基萘	1380	1628	1-甲基蒽	1966	2297
正十四烷	1400	1400	9-甲基蒽	1999	2351
苊烯	1719	1808	正二十烷	2000	2000
苊	1750	1833	3,6-二甲基菲	2037	2356
正十六烷	1600	1600	荧蒽	2091	2462
芴	1645	1935	芘	2139	2529
正十八烷	1800	1800	正二十二烷	2200	2200
菲	1836	2171	苯并[a]芴	2221	2607
蒽	1846	2179	苯并[b]芴	2236	2621
3-甲基菲	1938	2265	苯并[c]芴	2236	2628
2-甲基菲	1945	2274	1-甲基芘	2247	2629
2-甲基蒽	1955	2281	1-甲基芘	2273	2265

表 13-140 多环芳烃保留指数（六）[91]

固定液	SE-30	OV-101	SE-52	OV-7	OV-17			
柱温/℃ 化合物 I	250				250	270	290	310
萘	1296	1262	1114	1387	1457	1496	1509	1537
苊	1572	1569	1400	1706	1803	1834	1864	1883
芴	1662	1660	1483	1809	1900	1938	1961	1997
菲	1862	1856	1865	2020	2139	2174	2201	2246
蒽	1863	1861	1870	2027	2140	2183	2218	2253
荧蒽	2121	2120	2239	2306	2418	2472	2515	2562
芘	2178	2174	2246	2362	2501	2545	2585	2639
苯并[b]芴	2254	2257	2317	2418	2583	2632	2674	2727
苯并[a]蒽	2372	2198	2532	2780	2815	2861	2913	2968
䓛	2543	2508	2532	2800	2833	2878	2930	2987

表 13-141 多环芳烃保留指数（七）[137]

柱温：180℃

化合物 \ I \ 固定液	SPB-5	SPB-20	化合物 \ I \ 固定液	SPB-5	SPB-20
萘	1257	1348	苯并[a]蒽	2384	2548
薁	1378	1491	䓛	2392	2562
苊烯	1511	1629	苯并[b]荧蒽	2636	2816
苊	1512	1658	苯并[e]芘	2689	2881
芴	1633	1750	苯并[a]芘	2698	2891
菲	1815	1953	苝	2718	2917
蒽	1823	1960	二苯并[ac]蒽	2965	3170
4,5-亚甲基菲	1932	2081	二苯并[ah]蒽	2965	3173
荧蒽	2057	2201	苯并[ghi]苝	2978	3188
芘	2103	2251			

表 13-142 多环芳烃保留指数（八）[122]

柱温：240℃

化合物 \ I \ 固定液	DB-1	CP-sil5	DB-WAX	CP WAX52	化合物 \ I \ 固定液	DB-1	CP-sil5	DB-WAX	CP WAX52
萘	1290.1	1244.4	1910.9	1855.5	蒽	1861.2	1828.3	2810.7	2728.1
联苯	1442.3	1413.0	2117.1	2060.8	芘	2155.9	2118.9	—	3183.2
芴	1659.4	1629.8	2465.8	2396.6	䓛	2447.6	2406.4	—	—
菲	1850.4	1818.1	2822.3	2721.9					

表 13-143 多环芳烃保留指数（九）[illegible]

柱温：270℃

化合物 \ I \ 固定液	OV-101	OV-17	PFMS-6	化合物 \ I \ 固定液	OV-101	OV-17	PFMS-6
2-甲基萘	1354	1595	1657	并四苯	—		3092
联苯	—	—	1751	12-甲苯[a]蒽	2631	3092	
苊烯	1519	1808		7-甲苯[a]蒽	2669	3116	
苊	1550	1833	—	苯并[b]荧蒽	2795	3244	—
芴	1615	1935	2001	苯并[k]荧蒽	2802	3256	
菲	1836	2171	2248	苯并[j]荧蒽	2796	3258	—
蒽	1846	2179	2253	苯[e]嵌二萘	2858	3339	3159
3-甲基菲	1938	2265	—	苯[a]嵌二萘	2870	3353	3474
2-甲基菲	1945	2274	—	苝	2888	3383	3509
2-甲基蒽	1955	2281	—	二苯并[a,j]蒽	3112	3610	—
4-甲基菲	1959	2308	—	茚[1,2,3-cd]嵌二萘	3131	3510	—
9-甲基菲	1959	2302	—	二苯并[a,h]蒽	3137	3597	3776
4,5-二甲基菲	1963	2314	—	二苯并[a,c]蒽	3112	3601	3771
1-甲基蒽	1966	2297	—	苯并[b]䓛	3159	3632	
9-甲基蒽	1999	2354		苉	3159	3640	—
3,6-二甲基菲	2037	2356		苯并[ghi]苝	3185	3656	—
荧蒽	2091	2462	—	蒽缔蒽酮	3215	3695	—
嵌二萘	2139	2529	2714	晕苯	3488	3964	
1-甲基嵌二萘	2273	2665	—	1,2,4,5-二苯嵌二萘	3507	3971	—
苯并[c]菲	2461	2881		1,2,6,7-二苯嵌二萘	3508	3985	—
苯并[ghi]荧蒽	2473	2881	—	3,4,9,10-二苯嵌二萘	3526	4002	
苯并[a]蒽	2516	2935	3045	3,4,8,9-二苯嵌二萘	3537	4017	
䓛	2526	2953	3070				

表 13-144 多环芳烃保留指数（十）[101]

固定液	OV-101	OV-17	PFMS-6	固定液	OV-101	OV-17	PFMS-6
化合物 \ I \ 柱温/℃	250	270		化合物 \ I \ 柱温/℃	250	270	
菲	1836	2171	2276	苯[b]荧蒽	2755	3249	3365
蒽	1840	2179	2279	苯[k]荧蒽	2761	3256	3375
荧蒽	2091	2462	2645	苯[e]嵌二萘	2816	3339	3482
嵌二萘	2139	2529	2717	苯[a]嵌二萘	2822	3349	3495
苯并[c]菲	2427	2881	2997	苝	2911	3382	3531
苯并[a]蒽	2481	2935	3048	二苯并[a,j]蒽	3063	3573	3874
䓛	2489	2945	3077	二苯并[a,h]蒽	3089	3597	3916
并四苯	—	2954	3103	二苯并[a,c]蒽	3089	3601	3931

表 13-145 多环芳烃保留指数（十一）[21]

柱温：230℃

化合物 \ I \ 固定液	OV-1	OV-17	化合物 \ I \ 固定液	OV-1	OV-17	化合物 \ I \ 固定液	OV-1	OV-17
正十二烷	1200	1200	菲	1836	2171	正二十烷	2000	2000
萘	1255	1499	蒽	1846	2179	3,6-二甲基菲	2037	2356
2-甲基萘	1354	1595	3-甲基菲	1938	2265	荧蒽	2091	2462
1-甲基萘	1380	1628	2-甲基菲	1945	2274	芘	2139	2529
正十四烷	1400	1400	2-甲基蒽	1955	2281	正二十二烷	2200	2200
苊烯	1519	1808	4-甲基菲	1959	2308	苯并[a]芴	2221	2607
苊	1550	1833	9-甲基菲	1959	2302	苯并[b]芴	2236	2621
正十六烷	1600	1600	4,5-亚甲基菲	1963	2314	苯并[c]芴	2236	2628
芴	1645	1935	1-甲基蒽	1966	2297	4-甲基芘	2247	2629
正十八烷	1800	1800	9-甲基蒽	1999	2354	1-甲基芘	2273	2665

表 13-146 多环芳烃保留指数（十二）[21]

柱温：270℃

化合物 \ I \ 固定液	OV-1	OV-17	化合物 \ I \ 固定液	OV-1	OV-17
苯并[c]菲	2464	2881	茚并[1,2,3-cd]芘	3131	3610
苯并[ghi]荧蒽	2473	2881	二苯并[a,h]蒽	3137	3597
苯并[a]蒽	2516	2935	二苯并[a,c]蒽	3142	3601
䓛	2526	2953	苯并[b]䓛	3159	3632
三亚苯	2525	2953	苯并[ghi]苝	3185	3656
12-甲基苯并[a]蒽	2631	3092	二苯并[c,d,j,k]芘	3215	3695
7-甲基苯并[a]蒽	2669	3116	晕苯	3498	3968
苯并[b]荧蒽	2795	3249	萘并[1,2,3,4-def]䓛	3507	3971
苯并[k]荧蒽	2802	3256	二苯并[f,g,o,p]并四苯	3508	3983
苯并[j]荧蒽	2796	3258	苯并[r,s,t]戊芬	3526	4002
苯并[e]芘	2858	3339	二苯并[b,d,e,f]䓛	3537	4017
苯并[a]芘	2870	3353	正二十四烷	2400	2400
苝	2888	3382	正二十八烷	2800	2800
3-甲基胆蒽	2959	3421	正三十二烷	3200	3200
二苯并[a,j]蒽	3112	3573			

表 13-147　多环芳烃保留指数(十三)[33]

固定液：OV-101

化合物 \ 柱温/℃ (I)	230	270	化合物 \ 柱温/℃ (I)	230	270
菲	1836	—	二苯并[a,h]蒽	—	3137
蒽	1846	—	苯并[b]䓛	—	3159
芘	2139		晕苯		3498
苯并[a]蒽		2516	萘	1255	
䓛	—	2526	3-甲基胆蒽		2959
苯并[e]芘		2858	苊	1550	—
苝	—	2888	芴	1645	—
苯并[a]芘	—	2870	荧蒽	2091	—
苯并[ghi]苝	—	3185	苯并[k]荧蒽	—	2802
二苯并[a,c]蒽	—	3142			

表 13-148　多环芳烃保留指数（十四）[34]

柱温：270℃

化合物 \ 固定液 (I)	OV-101	OV-17	化合物 \ 固定液 (I)	OV-101	OV-17
苯并[c]菲	2464	2881	3-甲基胆蒽	2959	3421
苯并[ghi]荧蒽	2473	2881	二苯[a,j]蒽	3112	3573
苯并[a]蒽	2516	2935	茚并[1,2,3-cd]芘	3131	3610
䓛	2526	2953	二苯[a,h]蒽	3137	3597
三亚苯	2525	2953	二苯[a]蒽	3142	3601
2-甲基苯[a]蒽	2631	3092	苯并[b]䓛	3159	3632
7-甲基苯[a]蒽	2669	3116	苯并[ghi]苝	3185	3656
苯并[b]荧蒽	2795	3249	晕苯	3498	3968
苯并[k]荧蒽	2802	3256	1,2,4,5-二苯芘	3507	3971
苯并[j]荧蒽	2796	3258	1,2,6,7-二苯芘	3508	3983
苯并[e]芘	2858	3339	2,4,9,10-二苯芘	3526	4002
苯并[a]芘	2870	3353	2,1,8,9-二苯芘	3537	4017
苝	2888	3383	正二十四烷	2400	2400

第五节　其他烃类的保留指数

表 13-149　C_1～C_4 烃保留指数[81]

固定液：SE-30

化合物 \ 柱温/℃ (I)	-8	-3	0	11	21	30	30
甲烷	100	100	100	100	100	100	100
乙烯	180	180	178	179	185	—	—
乙炔	180	180	178	179	185	—	—
乙烷	200	200	200	200	200	200	200
丙烯	295	294	293	292	297	—	—
丙烷	300	300	300	300	300	300	300
丙炔	—	—	331		—	—	—
正丁烷	400	400	400	100	400	400	400

化合物 \ 柱温/℃ (I)	-8	3	0	11	21	30	60
异丁烷	366	366	366	366	366	368	365
1-丁烯	391	391	391	391	390	391	390
异丁烯	391	391	391	391	390	391	390
顺-2-丁烯	—	—	425		—		—
反-2-丁烯	—	—	411		—	—	—
1,3-丁二烯	395	—	391	394	394	395	397
丁炔	—	—	418	—	—	—	—

表 13-150 $C_1 \sim C_8$ 烃保留指数[illegible]

柱温：40°C

化合物	角鲨烷	Ucon LB 550X
甲烷	100	100
乙烷	200	200
乙烯	175	197
丙烷	300	300
丙烯	289	344
丁烷	400	400
1-丁烯	393	436
顺-2-丁烯	425	459
反-2-丁烯	406	447
2-甲基丙烷	366	376
2-甲基-1-丙烯	394	429
戊烷	500	500
1-戊烯	485	510
顺-2-戊烯	510	533
反-2-戊烯	506	525
2-甲基丁烷	475	477
2-甲基-1-丁烯	493	516
2-甲基-2-丁烯	522	542
3-甲基-1-丁烯	473	476
2，2-二甲基戊烷	408	411
己烷	600.0	600.0
1-己烯	583	608.7
顺-2-己烯	603.0	635.3
反-2-己烯	597	624.2
顺-3-己烯	593	615.5
反-3-己烯	592	615.2
2-甲基戊烷	570	566
2-甲基-1-戊烯	581	604.8
2-甲基-2-戊烯	598	626.3
4-甲基-顺-2-戊烯	559	583
4-甲基-反-2-戊烯	565	589
4-甲基-1-戊烯	559	583
3-甲基戊烷	584	585
3-甲基-1-戊烯	551	597
3-甲基-顺-2-戊烯	601.9	631.2
3-甲基-反-2-戊烯	612.5	641.7
2-乙基-1-丁烯	592	616.7
2，2-二甲基丁烷	535	535
3，3-二甲基-1-丁烯	511	518
2，3-二甲基丁烷	565	566
2，3-二甲基-1-丁烯	560	581
2，3-二甲基-2-丁烯	624.7	656.1
庚烷	700.0	700.0
1-庚烯	684.9	710.4
顺-2-庚烯	706.4	734.1
反-2-庚烯	701.8	725.6
顺-3-庚烯	693.6	718.9
反-3-庚烯	691.1	715.3
2-甲基己烷	668.2	660.8
2-甲基-1-己烯	680.5	706.8
2-甲基-2-己烯	695.1	722.3
2-甲基-顺-3-己烯	644.4	667.9
2-甲基-反-3-己烯	649.1	670.8
5-甲基-顺-2-己烯	672.3	696.7
5-甲基-反-2-己烯	661.5	683.1
5-甲基-1-己烯	652.7	673.8
3-甲基己烷	677.5	674.2
3-甲基-1-己烯	646.1	664.9
3-甲基-顺-2-己烯	692.8	721.2
3-甲基-反-2-己烯	702.8	729.0
3-甲基-顺-3-己烯	687.5	713.6
3-甲基-反-3-己烯	694.5	722.3
4-甲基-顺-2-己烯	657.2	677.2
4-甲基-反-2-己烯	659.0	678.9
4-甲基-1-己烯	659.9	681.9
2-乙基-1-戊烯	683.9	709.1
3-乙基戊烷	686.0	682.1
3-乙基-1-戊烯	647.8	672.3
3-乙基-2-戊烯	700.4	727.7
2，2-二甲基戊烷	625.6	617.6
4，4-二甲基-顺-2-戊烯	637.0	660.7
4，4-二甲基-反-2-戊烯	616.7	632.5
4，4-二甲基-1-戊烯	604.7	623.2
2，3-二甲基戊烷	672.7	669.3
2，3-二甲基-1-戊烯	651.7	674.2
2，3-二甲基-2-戊烯	706.5	735.1
3，4-二甲基-顺-2-戊烯	672.9	698.9
3，4-二甲基-反-2-戊烯	680.9	707.8
3，4-二甲基-1-戊烯	637.7	672.3
3-甲基-2-乙基-1-丁烯	662.5	684.8
2，4-二甲基戊烷	630.9	623.5
2，4-二甲基-1-戊烯	639.3	660.2
2，4-二甲基-2-戊烯	642.8	667.8
3，3-二甲基戊烷	658.4	655.1
3，3-二甲基-1-戊烯	627.1	643.6
2，2，3-三甲基丁烷	639.1	637.7
2，3，3-三甲基-1-丁烯	629.1	651.0
辛烷	800.0	800.0
1-辛烯	782.6	810.8
顺-2-辛烯	802.5	834.1
反-2-辛烯	799.0	826.8
顺-3-辛烯	790.0	816.5
反-3-辛烯	789.6	815.2
顺-4-辛烯	786.2	811.8

续表

固定液 / 化合物 I	角鲨烷	Ucon LB 550X
反-4-辛烯	784.6	810.0
2-甲基庚烷	764.8	763.0
2-甲基-1-庚烯	776.4	806.7
2-甲基-2-庚烯	791.1	820.6
2-甲基-顺-3-庚烯	736	760
2-甲基-反-3-庚烯	741.4	763.4
6-甲基-顺-3-庚烯	750	784
6-甲基-反-3-庚烯	748.6	771.1
6-甲基-顺-2-庚烯	771.9	795.7
6-甲基-反-2-庚烯	768.5	792.0
6-甲基-1-庚烯	748.2	775.1
3-甲基庚烷	772.0	771.6
3-甲基-1-庚烯	740.4	764.8
3-甲基-顺-2-庚烯	789.0	817.7
3-甲基-反-2-庚烯	798.4	829.6
3-甲基-顺-3-庚烯	777.7	805.4
3-甲基-反-3-庚烯	784.2	813.5
5-甲基-顺-3-庚烯	760.1	782.9
5-甲基-反-3-庚烯	755.9	764.0
5-甲基-顺-2-庚烯	776.8	806.
5-甲基-反-2-庚烯	767.6	792.9
5-甲基-1-庚烯	755.5	784.[illegible]
2-乙基-1-己烯	779.3	807.5
4-甲基庚烷	767.0	765.6
4-甲基-1-庚烯	746.9	774.7
4-甲基-顺-2-庚烯	746.2	772.7
4-甲基-反-2-庚烯	750.7	775.7
4-甲基-顺-3-庚烯	773.9	802.2
4-甲基-反-3-庚烯	778.9	807.7
3-正丙基-1-戊烯	768	796.7
3-乙基己烷	772.2	773.7
3-乙基-1-己烯	738.3	762.0
3-乙基-顺-2-己烯	783.6	813.2
3-乙基-反-2-己烯	781.8	810.7
3-乙基-3-己烯	772.7	800.8
4-乙基-顺-2-己烯	748.8	772.7
4-乙基-反-2-己烯	742.7	764.2
4-乙基-1-己烯	757.1	784.5
2,2-二甲基己烷	718.8	715.3
2,2-二甲基-顺-3-己烯	716.9	738.0
2,2-二甲基-反-3-己烯	693.8	716.0
5,5-二甲基-顺-2-己烯	723.7	747.9
5,5-二甲基-反-2-己烯	708.2	728.3
5,5-二甲基-1-己烯	706.3	726.3
2,3-二甲基己烷	760.0	758.8
2,3-二甲基-1-己烯	741.0	765.7
2,3-二甲基-2-己烯	788.8	819.4
2,3-二甲基-顺-3-己烯	749.2	776.3
2,3-二甲基-反-3-己烯	751.3	778.6
4,5-二甲基-顺-2-己烯	736.8	760.9
4,5-二甲基-反-2-己烯	735.3	757.8
4,5-二甲基-1-己烯	741.9	770.0
2-异丙基-1-戊烯	746.7	771.7
2,4-二甲基己烷	731.4	727.6
2,4-二甲基-1-己烯	743.1	769.3
2,4-二甲基-2-己烯	730.8	755.7
2,4-二甲基-顺-3-己烯	725.4	749.5
2,4-二甲基-反-3-己烯	728.0	753.2
3,5-二甲基-顺-2-己烯	752.3	777.7
3,5-二甲基-反-2-己烯	751.7	777.5
3,5-二甲基-1-己烯	699.5	719.4
4-甲基-2-乙基-1-戊烯	737.0	758.6
2,5-二甲基己烷	727.8	724.9
2,5-二甲基-1-己烯	743.5	770.9
2,5-二甲基-2-己烯	749.5	776.9
2,5-二甲基-顺-3-己烯	701	721
2,5-二甲基-反-3-己烯	696.0	716.0
3,3-二甲基己烷	741.9	740.1
3,3-二甲基-1-己烯	714.2	735.3
4,4-二甲基-顺-2-己烯	743.8	772.5
4,4-二甲基-反-2-己烯	747.6	768.6
4,4-二甲基-1-己烯	724.6	750.4
3,4-二甲基-α-己烷	770.5	770.5
3,4-二甲基-β-己烷	770.5	770.5
3,4-二甲基-α-1-己烯	710.8	766.4
3,4-二甲基-β-1-己烯	742.1	767.3
3,4-二甲基-顺-2-己烯	757.2	781.8
3,4-二甲基-反-2-己烯	761.4	786.4
3,4-二甲基-顺-3-己烯	783.3	814.0
3,4-二甲基-反-3-己烯	777.4	806.9
3-甲基-2-乙基-1-戊烯	750.9	776.5
2-甲基-3-乙基戊烷	759.8	761.3
2-甲基-3-乙基-1-戊烯	734.9	760.1
2-甲基-3-乙基-2-戊烯	778.4	808.8
4-甲基-3-乙基-顺-2-戊烯	768.2	796.7
4-甲基-3-乙基-反-2-戊烯	756.9	784.3
4-甲基-3-乙基-1-戊烯	726	750.4
3-甲基-3-乙基戊烷	772.0	773.3
3-甲基-3-乙基-1-戊烯	743.6	765.6
2,2,3-三甲基戊烷	735.6	733.5
3,4,4-三甲基-顺-2-戊烯	761.2	789.7
3,4,4-三甲基-反-2-戊烯	747.1	775.6
3,4,4-三甲基-1-戊烯	703.0	722.3
3,3-二甲基-2-乙基-1-丁烯	731.4	754.6
2,2,4-三甲基戊烷	689.1	679.9
2,4,4-三甲基-2-戊烯	715.4	741.8
2,4,4-三甲基-1-戊烯	706.4	725.0
2,3,3-三甲基戊烷	756.7	755.7

续表

固定液 / I / 化合物	角鲨烷	Ucon LB 550X	固定液 / I / 化合物	角鲨烷	Ucon LB 550X
2，3，3-三甲基-1-戊烯	733.8	759.0	2，3，4-三甲基-2-戊烯	766.0	796.0
3，3，4-三甲基-1-戊烯	724.2	746.9	3-甲基-2-异丙基-1-丁烯	712.4	732.3
2，3，4-三甲基戊烷	750.7	750.3	2，2，3，3-四甲基丁烷	723.7	723.1
2，3，4-三甲基-1-戊烯	726.4	751.3			

表 13-151　C_1～C_{10}烃保留指数[8]

固定液：角鲨烷

柱温/℃	27	49	67	86	$\frac{\partial I}{\partial T}$
保留指数 / 化合物	I				
甲　烷	100.0	100.0	100.0	100.0	0.000
二氧化碳	151.2	153.1	152.3	151.9	−0.032
乙　炔	155.1	156.8	156.0	156.0	0.000
乙　烯	177.1	177.2	177.8	178.1	0.017
乙　烷	200.0	200.0	200.0	200.0	0.000
丙　烯	286.7	287.0	287.7	288.0	0.015
丙　炔	296.8			298.7	0.032
丙　烷	300.0	300.0	300.0	300.0	0.000
氧硫化碳	301.2	302.6	304.2	305.4	0.071
丙二烯	317.0	317.7	318.9	319.8	0.047
氯甲烷	323.8	325.8	327.3	329.4	0.097
环丙烷	343.6	314.7	346.0	347.2	0.064
氯乙烯	362.0	363.2	364.1	365.8	0.071
甲基丙烷	365.3	365.7	365.8	366.1	0.012
1-丁烯-3-炔	372.9	373.4	373.6	373.9	0.019
甲基丙烯	383.2			383.5	0.005
1-丁烯	384.8	381.9	385.1	385.1	0.007
1-丁炔	385.4	385.3	385.3	385.3	0.000
1,3-丁二烯	385.8	386.5	387.1	387.9	0.037
甲硫醇	393.4	396.4	398.5	101.4	0.136
丁　烷	400.0	400.0	400.0	400.0	0.000
反-2-丁烯	406.7	405.9	107.0	406.5	−0.003
2,2-二甲基丙烷	411.1	412.6	413.3	413.4	0.056
氯乙烷	414.4	415.4	415.5	416.7	0.036
顺-2-丁烯	116.5	416.7	417.4	417.6	0.019
1,2-丁二烯	429.4	430.4	130.3	430.4	0.005
环丁烯	431.7	433.3	432.7	434.1	0.041
3-甲基-1-丁烯	419.2	450.0	451.6	452.0	0.047
2-甲基-1-丁烯-3-炔	156.5	456.8	456.9	456.5	0.010
环丁烷	462.1	464.1	464.6	466.7	0.078
1,4-戊二烯	463.3	464.3	464.9	464.8	0.041
2-丁炔	463.3	463.2	163.0	462.2	−0.007
2-甲基丁烷	474.0	474.9	475.8	475.8	0.041
2-氯丙烷	474.6	476.7	478.0	480.0	0.092
1,反-2-二甲基环丙烷	479.4	180.0	180.4	480.1	0.027
1-戊烯	481.0	481.3	483.1	483.1	0.036
1-戊炔	484.1	484.4	481.3	484.3	0.005
2-甲基-1-丁烯	488.1	488.1	488.6	488.6	0.008
异戊二烯	496.4	497.4	500.8	501.1	0.089
戊　烷	500.0	500.0	500.0	500.0	0.000
反-2-戊烯	501.2	500.2	501.5	499.7	−0.025
碘甲烷	501.6	508.3	512.8	518.0	0.278
顺-2-戊烯	505.1	504.8	506.3	506.8	0.029
3,3-二甲基-1-丁烯	505.5	506.9	508.8	509.9	0.075
乙基环丙烷	508.6	509.7	512.3	515.1	0.149
3-甲基-1,2-丁二烯	511.6	511.3	511.1	510.1	−0.014
2-甲基-2-丁烯	513.9	514.5	515.1	514.8	0.027
1,顺-2-二甲基环丙烷	513.9	515.7	516.6	517.8	0.068
1,反-3-戊二烯	515.1	515.7	518.1	516.8	0.063
1-氯丙烷	517.6	520.6	522.4	524.4	0.107
2-氯-2-甲基丙烷	518.2	521.0	523.2	524.9	0.125
1,3-环戊二烯	518.6	521.5	527.5	529.8	0.190
1,顺-3-戊二烯	523.9	524.7	528.0	528.6	0.080
1,2-戊二烯	525.9	526.6	527.2	527.1	0.031
3-甲基-1,4-戊二烯	530.8	532.3	533.5	534.1	0.068
2,3-戊二烯	532.0	531.2	530.7	529.6	−0.032
亚甲基环丁烷	533.5	535.8	537.3	539.0	0.088
2,2-二甲基丁烷	535.1	537.0	538.8	540.1	0.083
环戊烯	546.7	549.9	553.4	555.6	0.151
1,1,2-三甲基环丙烷	548.6	549.9	550.9	552.0	0.058
4-甲基-1-戊烯	548.6	549.9	551.4	551.8	0.058
2-戊炔	549.4	548.3	548.4	547.0	−0.011
3-甲基-1-戊烯	550.0	551.7	553.7	554.8	0.081
4-甲基-1-戊炔	551.6	552.0	552.9	553.0	0.024
2-溴丙烷	554.5	558.2	561.5	564.7	0.175
4-甲基-顺-2-戊烯	555.7	555.9	557.9	557.8	0.036
2,3-二甲基-1-丁烯	557.6	558.4	561.0	—	0.069
4-甲基-反-2-戊烯	562.0	561.7	563.0	-	0.012
环戊烷	562.9	566.3	569.3	572.0	0.151
1,5-己二烯	563.3	564.2	565.7	565.7	0.011
2,3-二甲基丁烷	565.5	567.4	569.5	570.8	0.090
溴氯代甲烷	569.0	571.6	578.3	581.8	0.195
2-甲基戊烷	569.4	569.7	570.0	—	0.015
异丙基环丙烷	569.8	572.3	575.1	577.1	0.124
2-甲基-1-戊烯	579.8	580.4	581.9	581.8	0.034
1-己烯	581.8	582.9	583.9	584.2	0.049

续表

柱温/℃ 保留指数 化合物	27	49	67	86	$\frac{\partial I}{\partial T}$
	I				
2-氯丁烷	582.9	585.7	587.9	590.7	0.144
1,反-4-己二烯	582.9	583.1	583.1	585.2	0.005
3-甲基戊烷	583.1	584.3	585.4	586.0	0.058
1-己炔	585.5	585.7	586.9	586.7	0.020
1,顺-4-己二烯	587.8	588.5	589.2	589.7	0.032
1-氯-2-甲基丙烷	588.0	591.3	593.7	596.6	0.146
碘乙烷	591.0	598.4		608.8	0.302
2-乙基-1-丁烯	591.8	592.1	593.5	593.0	0.029
顺-3-己烯	592.4	592.8	594.0	593.8	0.024
反-3-己烯	593.5	592.6	592.9	591.8	0.029
2-溴-2-甲基丙烷[1]	595.3	599.8	603.3	—	0.202
1-溴丙烷	596.7	601.1	605.9	609.6	0.210
反-2-己烯	597.3	597.0	598.2	597.1	0.002
2-甲基-2-戊烯	598.0	598.2	599.0	598.1	0.010
2-乙基-1,3-丁二烯	598.6	599.3	600.5	600.5	0.032
己烷	600.0	600.0	600.0	600.0	0.000
2-甲基-1,顺-3-戊二烯[2]	600.4	600.9	601.8	602.2	0.031
3-甲基环戊烯	600.6	604.0	607.7	609.9	0.158
3-甲基-顺-2-戊烯	602.3	603.1	604.6	604.8	0.042
4,4-二甲基-1-戊烯	603.1	605.2	607.2	608.5	0.092
顺-2-己烯	603.5	604.6	605.6	605.6	0.036
2,3-二甲基-1,3-丁二烯	610.4	610.9	612.8	612.6	0.037
1,反-3-己二烯	612.5	613.5	614.4	615.1	0.047
3-甲基-反-2-戊烯	612.9	613.2	614.4	613.8	0.015
2-环丙基丙烯	614.8	616.1	617.4	618.9	0.075
4,4-二甲基-反-2-戊烯	615.1	615.1	615.1	614.7	0.020
1,1,2,2-四甲基环丙烷	617.7	620.5	622.3	--	0.120
乙基环丁烷	618.7	621.7	624.6	626.5	0.131
2-甲基环-1,3-戊二烯[2]	621.0	623.9	627.1	-	0.149
1,反-3-己二烯[2]	622.5	622.0	621.5	620.8	0.032
1-甲基-1,3-环戊二烯[2]	622.9	626.0	628.5	-	0.139
3,3-二甲基-1-戊烯	623.9	627.0	629.5	631.5	0.141
2,2-二甲基戊烷	624.3	625.8	627.2	628.4	0.078
甲基环戊烷	624.3	628.6	632.1	634.7	0.195
2,3-二甲基-2-丁烯	624.9	625.8	626.7	626.7	0.043
2,3,3-三甲基-1-丁烯	625.8	628.8	631.0	632.8	0.131
2-甲基-1,反-3-戊二烯	626.4	627.7	628.7	629.1	0.058
4-甲基-1,3-戊二烯	627.9	628.8	630.5	630.7	0.037
2,4-二甲基戊烷	629.1	629.8	630.5	631.1	0.031
3-己炔	629.7	627.9	626.7	624.3	−0.080
4,4-二甲基-顺-2-戊烯	633.3	636.4	638.2	640.1	0.100
苯	634.3	639.7	644.6	648.9	0.247
3,4-二甲基-1-戊烯	634.9	637.6	640.0	641.6	0.122
2,4-二甲基-1-戊烯	636.2	637.8	639.7	640.6	0.075
2,2,3-三甲基丁烷	636.8	640.2	643.3	645.7	0.149
3-甲基-1,顺-3-戊二烯	637.2	638.8	640.0	640.6	0.071
2-氯-2-甲基丁烷	637.8	642.1	645.1	649.8	0.208
3-甲基-1,反-3-戊二烯	640.3	642.6	644.4	646.9	0.103
2,4-二甲基-2-戊烯	641.1	640.9	640.8	--	−0.017
1-甲基环戊烯	642.2	645.2	647.7	649.8	0.136
3-甲基-1-己烯	643.0	645.4	646.7	647.5	0.093
反-2,反-4-己二烯	645.1	645.9	647.2	647.5	0.013
2-己炔	645.1	644.2	643.6	642.2	0.041
3-乙基-1-戊烯	645.3	647.8	650.0	651.3	0.115
2-甲基-反-3-己烯	646.0	647.8	647.4	646.7	0.017
2,3-二甲基-1-戊烯	648.6	650.6	653.1	-	0.112
1,3-环己二烯	649.1	654.6	658.7	663.5	0.211
5-甲基-1-己烯	649.3	650.6	652.1	652.5	0.051
二溴甲烷	652.8	660.3	665.6	671.1	0.237
顺-2,反-4-己二烯	653.2	654.1	655.1	655.6	0.041
5-甲基-1-己炔	653.6	654.8	655.6	656.0	0.07[illegible]
4-甲基-顺-2-己烯	654.1	655.8	656.9	657.8	0.071
3,3-二甲基戊烷	656.1	659.1	661.3	663.8	0.1[illegible]
4-甲基-反-2-己烯	656.1	657.0	658.5	658.6	[illegible]
4-甲基-1-己烯	657.2	658.6	660.3	661.0	0.061
环己烷	658.1	663.8	667.9	672.3	0.2[illegible]
3-甲基-2-乙基-1-丁烯	658.6	659.8	660.5	661.	0.0[illegible]7
5-甲基-反-2-己烯	659.7	660.0	660.5	660.6	0.017
2-溴丁烷	660.1	666.0	670.3	674.[illegible]	0.2[illegible]
2-甲基-1,5-己二烯	660.7	661.2	662.6	663.0	0.057
顺-2,顺-4-己二烯	661.3	662.2	663.1	663.7	0.041
1,6-庚二烯	662.8	664.1	664.6	664.8	0.046
1,6-庚二炔	663.6	663.4	663.8	663.5	−0.0[illegible]2
二氯溴代甲烷	664.9	671.4	676.1	680.6	0.280
1-溴-2-甲基丙烷	666.1	671.2	675.9	680.0	0.236
2-甲基己烷	666.3	666.9	666.9	667.[illegible]	0.0[illegible]5
环己烯	666.9	672.6	676.9	681.1	0.261
1,1-二甲基环戊烷	669.2	674.0	677.1	681.1	0.19[illegible]
3,4-二甲基-顺-2-戊烯	669.9	671.2	672.1	672.7	0.055
2,3-二甲基戊烷	670.1	671.9	673.6	675.2	0.08[illegible]
3-甲基己烷	675.9	676.4	677.2	677.7	0.031
2-甲基-1-己烯	677.8	678.7	679.0	679.3	0.01[illegible]
2,5-降冰片二烯	677.8	683.0	687.[illegible]	691.2	0.237
3,4-二甲基-反-2-戊烯	678.1	679.0	679.5	679.8	0.027
1,顺-3-二甲基环戊烷	679.4	683.2	686.2	689.4	0.169
1-溴-2-氯乙烷	680.9	687.9	693.1	698.0	0.30[illegible]
1-庚烯	681.5	682.5	682.8	683.1	0.017
2-乙基-1-戊烯	682.3	682.3	682.8	683.2	0.022
1,反-3-二甲基环戊烷	683.1	687.5	690.5	693.8	0.17[illegible]
3-乙基戊烷	684.8	686.3	687.4	688.3	0.061
3-甲基-反-3-己烯	684.8	685.1	685.9	686.1	0.022
1,4-环己二烯	685.0	690.3	694.4	698.1	0.23[illegible]
1,反-2-二甲基环戊烷	685.7	689.8	692.8	695.8	0.17[illegible]
2-碘-2-甲基丙烷	686.1	693.9	699.2		0.33[illegible]
1-庚炔	686.5	686.3	686.1	686.3	−0.00[illegible]
2,4-二甲基-1,3-戊二烯	686.5	687.2	687.7	687.3	0.031

续表

柱温/℃ 化合物＼保留指数	27	49	67	86	$\frac{\partial I}{\partial T}$
	I				
1-氯-3-甲基丁烷	687.5	691.3	693.8	696.9	0.159
2-氯戊烷			686.2	—	—
2,2,4-三甲基戊烷	687.9	690.3	692.3	694.3	0.108
反-3-庚烯	688.1	687.9	688.2	687.8	−0.005
顺-3-庚烯	690.2	691.0	691.8	692.2	0.037
3-甲基-顺-3-己烯	691.7	692.0	691.8	691.3	−0.019
2-甲基-2-己烯	691.9	691.7	691.8	691.6	−0.005
3-甲基-反-2-己烯	692.7	693.9	694.0	695.2	0.051
3-乙基-2-戊烯	697.3	697.9	698.5	698.7	0.027
1-溴丁烷	698.5	703.8	707.5	711.2	0.202
3-氯戊烷	—		694.6	—	—
1,1-二溴乙烷	698.5	706.2	712.1	717.8	0.311
反-2-庚烯	699.2	699.1	699.0	698.8	−0.005
庚烷	700.0	700.0	700.0	700.0	0.000
3-甲基-顺-2-己烯	700.6	701.0	701.3	702.1	0.019
2,4,4-三甲基-2-戊烯	701.1	704.5	707.0	709.2	0.141
2,3-二甲基-2-戊烯	702.5	704.0	704.9	705.5	0.061
顺-2-庚烯	702.9	703.8	704.4	704.4	0.037
降冰片-2-烯	703.9	710.0	715.0	719.8	0.276
3-乙基环戊烯	709.5	713.5	716.5	719.8	0.175
乙烯基环戊烷	710.1	715.0	718.6	722.2	0.197
1,顺-2-二甲基环戊烷	716.6	721.6	725.3	729.3	0.210
2,2-二甲基己烷	718.2	719.7	720.4	721.3	0.047
1,1,3-三甲基环戊烷	719.7	724.0	727.1	731.3	0.200
2,2,3,3-四甲基丁烷	720.5	726.1	730.2	734.7	0.239
甲基环己烷	720.5	726.6	731.0	736.2	0.266
1-氯丙烷	721.9	725.2	728.9	730.0	0.131
3-庚炔	723.4	721.6	720.4	718.7	0.080
二环丙基甲烷	724.8	728.7	731.3	733.8	0.137
亚甲基环己烷	726.1	732.3	736.4	741.0	0.242
2,5-二甲基己烷	727.1	728.5	728.9	729.3	0.022
3-甲基环己烯	728.2	734.1	738.8	743.5	0.249
4-甲基环己烯	728.2	734.4	738.8	743.5	0.249
乙基环戊烷	729.1	734.1	737.7	741.4	0.195
2,4-二甲基己烷	730.8	732.1	732.8	733.6	0.012
2,2,3-三甲基戊烷	733.5	737.3	740.1	742.9	0.153
1,反-2,顺-3-三甲基环戊烷	737.7	741.3	744.2	747.9	0.163
3,3-二甲基己烷	740.0	743.7	745.7	748.2	0.132
甲苯	740.6	746.8	751.2	755.6	0.212
降冰片烷	741.6	748.7	753.7	759.2	0.302
1-乙基环戊烯	744.3	747.3	749.1	751.3	0.129
1,反-2,顺-4-三甲基环戊烷	744.5	748.0	750.9	754.5	0.161
2-庚炔	746.8	746.3	745.7	744.5	0.027
2,3,4-三甲基戊烷	748.9	752.5	754.8	757.2	0.127
2,3,3-三甲基戊烷	751.0	759.6	763.0	766.8	0.202
1,3,5-环庚三烯	755.5	762.9	768.7	774.9	0.327
1-甲基环己烯	757.5	762.9	766.1	770.2	0.214
2,3-二甲基己烷	758.8	760.3	761.2	762.3	0.058
2-甲基-3-乙基戊烷	758.1	761.5	763.0	764.9	0.100
偶[illegible]-甲基丙烷	759.0	767.2	772.9	779.0	0.320
亚乙基环戊烷	765.4	767.9	770.8	774.1	0.175
2-甲基庚烷	763.6	764.8	764.9	765.2	0.017
4-甲基庚烷	766.0	767.0	767.2	767.5	0.015
3,4-二甲基己烷	767.9	770.8	771.8	773.8	0.100
1,顺-2,反-4-三甲基环戊烷	768.5	773.6	777.0	781.8	0.225
3-甲基-3-乙基戊烷	768.7	774.1	777.0	780.7	0.195
3-乙基己烷	770.2	772.4	772.9	774.0	0.068
环庚烯	770.4	776.7	782.2	788.8	0.297
3-甲基庚烷	771.6	772.2	772.4	773.5	0.034
1,顺-2,反-3-三甲基环戊烷	774.3	779.3	782.9	787.7	0.227
3,4-二甲基-反-3-己烯	776.2	777.9	779.3	780.7	0.076
反-2,反-6-辛二烯	-		—	793.5	
1-甲基-1,4-环己二烯	779.9	786.7	789.9	794.2	0.219
3,4-二甲基-顺-3-己烯	782.2	783.6	784.8	786.0	0.064
1-乙基,Z-3-甲基环戊烷	783.9	788.1	791.2	795.5	0.193
环庚烷	785.9	795.0	800.0	806.5	0.354
1-乙基,反-3-甲基环戊烷	786.1	790.5	794.1	—	0.202
1-乙基,反-2-甲基环戊烷	787.0	791.4	794.6	799.3	0.211
顺-2,反-6-辛二烯	—		—	799.9	
辛烷	800.0	800.0	800.0	800.0	0.00
双-1,4(外亚甲基)-环己烷		—	-	803.0	—
反-2,反-6-辛二烯	—	—		806.9	—
异丙基环戊烷	806.6	812.2	817.1	822.0	0.261
4-乙烯基环己烯	808.9	817.8	823.9	830.6	0.353
2,4-二甲基庚烷	—	820.2	820.7	821.0	0.020
1-乙基-顺-2-甲基环戊烷	815.6	821.1	825.5	830.5	0.251
4-甲基-2-丙基-1-戊烯	—	821.8	823.6	824.9	0.083
2,4-二甲基-1-庚烯		828.9	830.4	831.1	0.068
丙基环戊烷	825.9	830.3	834.1	837.9	0.203
乙基环己烷	828.0	834.3	839.4	844.9	0.286
乙基苯	829.0	835.9	841.2	846.1	0.280
2,3,3-三甲基己烷		840.1	-		—
对二甲苯	844.4	850.0	855.4	860.2	0.268
间二甲苯	846.7	852.3	857.5	862.3	0.264
苯乙烯	856.6	862.9	868.8	874.3	0.300
4-甲基辛烷	—	863.1	—	-	
邻二甲苯	864.1	870.7	876.9	882.1	0.310
环辛烯	875.3	884.3	892.4	900.5	0.424
壬烷	900.0	900.0	900.0	900.0	0.000
1,5-环辛二烯	—	903.1	910.8	918.0	0.396
α-蒎烯	-		—	928.2	
环辛烷	—	912.1	920.5	928.3	0.124
莰烯	-	—	-	945.3	—
β-蒎烯	—	-		966.0	
2,4-二甲基-4-乙基环己烯	-	—	—	954.6	—
香叶烯	—			966.8	
2,6-二甲基-1,4,6-辛三烯[2]	-	—		988.3	—
反-对盖烷	—		—	988.3	
顺-对盖烷	—		—	998.1	
Δ-3-蒈烯	-	—	—	998.7	- -
癸烷	—	—		1000.0	—
1,5-对盖二烯	—	—	-	1005.6	—
对伞花烃	—		—	1010.7	
6,8-间盖二烯	—		—	1018.1	
1,8-对盖二烯	-	—		1021.3	—
3a,4,7,7a-四氢-5-甲基茚	-		—	[illegible]	
十一碳烷	—	·	—	1100.0	

1 在27℃时没有分解现象，之后分解逐渐加剧，到86℃时几乎全部分解。

2 这种结构鉴定时未肯定。

表 13-152　C_2～C_8 烃保留指数[illegible]

固定液	角鲨烷	二甲基环丁砜	固定液	角鲨烷	二甲基环丁砜
I　柱温/℃ 化合物	26	35	I　柱温/℃ 化合物	26	35
正丙烷	300	300	反-2-己烯	596	664
2-甲基丙烷	363	360	顺-3-己烯	593	663
正丁烷	400	400	反-3-己烯	595	657
2,2-二甲基丙烷	412	406	2-甲基-1-戊烯	575	652
2-甲基丁烷	476	468	3-甲基-1-戊烯	555	604
正戊烷	500	500	4-甲基-1-戊烯	554	607
2,2-二甲基丁烷	530	531	2-甲基-2-戊烯	600	676
2,3-二甲基丁烷	567	567	顺-3-甲基-2-戊烯	606	696
2-甲基戊烷	571	568	反-3-甲基-2-戊烯	597	685
3-甲基戊烷	583	586	顺-4-甲基-2-戊烯	561	615
正己烷	600	600	反-4-甲基-2-戊烯	558	619
2,2-二甲基戊烷	625	—	2,3-二甲基-1-丁烯	559	632
2,3-二甲基戊烷	670	—	3,3-二甲基-1-丁烯	515	556
2,4-二甲基戊烷	630	635	2,3-二甲基-2-丁烯	612	716
3,3-二甲基戊烷	656	—	2-乙基-1-丁烯	587	672
3-甲基己烷	679	685	2,4-二甲基-1-戊烯	634	706
3-乙基戊烷	684	690	顺-4,4-二甲基-2-戊烯	629	690
正庚烷	700	700	反-4,4-二甲基-2-戊烯	617	658
2,2,3-三甲基戊烷	728	-	2,3,3-三甲基-1-丁烯	621	704
2,2,4-三甲基戊烷	687	688	乙炔	230	130
丙烯	289	354	丙炔	340	539
1-丁烯	385	447	1-丁炔	120	618
顺-2-丁烯	407	186	2-丁炔	473	682
反-2-丁烯	407	471	丙二烯	336	462
2-甲基戊烯	382	449	1,2-丁二烯	427	576
1-戊烯	483	545	1,3-丁二烯	389	534
顺-2-戊烯	505	578	1,2-戊二烯	527	675
反-2-戊烯	504	569	反-1,3-戊二烯	518	682
2-甲基-1-丁烯	486	562	1,4-戊二烯	471	588
3-甲基-1-丁烯	454	509	2,3-戊二烯	539	677
2-甲基-2-丁烯	511	--	3-甲基-1,2-丁二烯	513	651
1-己烯	583	652	2-甲基-1,3-丁二烯	199	645
顺-2-己烯	600	679	1,5-己二烯	576	698

表 13-153　C_2～C_{14}烃保留指数[86]

柱温：120℃

I　固定液 化合物	Zonyl E 7	PEG1540	三氟基乙氧基丙烷	聚苯醚六环	DEGS
乙烷	200	200	200	200	200
丙烷	300	300	300	300	300
丁烷	400	400	400	400	400
异丁烷	376	364	359	358	359
戊烷	500	500	500	500	500
己烷	600	600	600	600	600

续表

化合物 \ I \ 固定液	Zonyl E 7	PEG1540	三氰基乙氧基丙烷	聚苯醚六环	DEGS
环己烷	675	751	816	735	821
庚烷	700	700	700	700	700
2-甲基庚烷	780	761	769	760	765
3-甲基庚烷	793	778	789	774	784
2,4-二甲基戊烷	616	594	544	608	664
正辛烷	800	800	800	800	800
正壬烷	900	900	900	900	900
2,2,5-三甲基己烷	813	757	759	759	757
癸烷	1000	1000	1000	1000	1000
十氢化萘	1186	1284	1408	1241	1370
四氢化萘	1057	1156	1275	1117	1239
十一烷	1100	1100	1100	1100	1100
十二烷	1200	1200	1200	1200	1200
十三烷	1300	1300	1300	1300	1300
十四烷	1400	1400	1400	1400	1400
乙烯	222	308	363	270	465
丙烯	324	395	450	360	533
1-丁烯	422	483	536	450	601
戊烯	522	581	632	552	689
1-己烯	598	534	679	614	712
1-庚烯	722	744	794	723	805
1-辛烯	822	843	890	819	893
2-顺-辛烯	848	879	939	849	931
2-乙基己烯	837	854	922	824	894
2-丁炔	595	790	890	587	838
1-辛炔	937	1030	1187	907	1118
2-辛炔	975	1075	1229	979	1167
苯	871	979	1257	833	1141
甲苯	994	1078	1363	938	1242
乙基苯	1084	1162	1439	1035	1333
苯乙烯	1150	1280	1620	1094	1510
乙炔基苯	1116	1386	1698	1096	1567
邻二甲苯	1112	1182	1475	1046	1360
间二甲苯	1115	1188	1479	1050	1362
对二甲苯	1113	1180	1473	1041	1350
1,3,5-三甲苯	1233	1311	1587	1155	1481
A-蒎烯	1007	1064	1143	1015	1131

表 13-154 C_4~C_6 烃保留指数（一）[139]

固定液：SE-54　　柱温：50℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
1-丁烯	402.0	4-甲基-1-戊烯	559.5	己烷	600.0
1-戊烯	492.0	4-甲基-2-戊烯	561.8	2-己烯	607.9
乙基环丙烷	509.3	环戊烷	571.1	3-甲基-2-戊烯	609.9
2-甲基-1-丁烯	522.8	2-甲基-1,3-戊二烯	570.0	3-甲基-1,4-戊二烯	616.9
2-甲基-2-丁烯	529.7	2,3-二甲基-1,3-丁二烯	582.5	3-甲基环戊烯	620.0
1,3-戊二烯	542.3	1-己烯	592.2	甲基环戊烷	633.1

表 13-155　C_4～C_6烃保留指数（二）[118]

固定液	角鲨烷			二甲基硅油 JXR		
化合物 \ I \ 柱温/℃	30	40	50	30	40	50
反-2-丁烯	407.0	407.2	406.9	411.1	410.5	406.4
顺-2-丁烯	417.1	417.5	417.0	425.5	424.7	423.8
3-甲基-1-丁烯	449.3	449.8	450.0	457.2	457.2	455.4
1,4-戊二烯	463.4	463.7	464.3	484.6	484.4	483.3
2-甲基丁烷	474.1	474.5	474.9	475.0	475.0	474.8
1-戊烯	481.1	481.5	481.3	488.9	488.8	488.5
2-甲基-2-丁烯	488.1	488.2	488.1	495.3	495.3	495.3
2-甲基-1,3-丁二烯	496.6	497.4	497.5	504.4	504.6	504.9
反-2-戊烯	501.1	500.9	500.2	507.3	504.6	504.9
顺-2-戊烯	505.2	505.5	504.8	512.3	515.3	515.1
2-甲基-2-丁烯	513.8	513.6	514.5	519.9	521.2	522.5
反-1,3-戊二烯	515.3	515.9	515.8	522.2	522.3	522.7
环戊二烯	519.2	521.1	521.7	533.4	534.2	534.8
顺-1,3-戊二烯	524.1	524.9	524.8	533.4	534.2	534.8
2,2-二甲基丁烷	535.3	536.2	537.1	533.4	534.2	534.8
环戊烯	547.2	548.7	550.1	552.8	553.9	555.1
3-甲基-1-戊烯	550.2	551.1	551.8	557.7	557.7	557.7
顺-4-甲基-2-戊烯	558.8	556.2	555.9	568.6	566.9	567.0
2,3-二甲基-1-丁烯	557.8	558.5	555.9	565.3	566.0	567.0
反-4-甲基-2-戊烯	562.0	562.2	561.7	570.2	569.7	570.1
环戊烷	563.4	564.9	566.5	563.5	564.9	566.2
2,3-二甲基丁烷	565.8	566.7	567.5	566.8	566.5	567.0
2-甲基戊烷	569.4	569.6	569.7	570.2	569.7	570.1
2-甲基-1-戊烯	579.9	580.2	580.4	587.4	583.6	583.9
1-己烯	581.9	582.4	583.0	588.3	588.1	587.9
3-甲基戊烷	583.3	583.9	584.6	583.1	583.6	583.9

表 13-156　C_4～C_7烃保留指数[107]

固定液	SE 30	Carbowax 20M		1,2,3-三(2-氰乙氧基)丙烷		固定液	SE 30	Carbowax 20M		1,2,3-三(2-氰乙氧基)丙烷	
化合物 \ I \ 柱温/℃	70	130	70	130	70	化合物 \ I \ 柱温/℃	70	130	70	130	70
异丁烷	369	369	372	—		2-甲基-1-丁烯	497	545	534	630	626
2-甲基丁烷	478	467	471	470	470	2-甲基-1-戊烯	589	634	623	723	720
2-甲基戊烷	577	566	569	568	568	2-甲基-1-己烯	687	735	723	824	821
3-甲基戊烷	584	577	581	580	580	3-甲基-1-丁烯	460	490	487	552	552
4-甲基庚烷	771	764	768	767	767	4-甲基-1-戊烯	557	595	589	650	650
4-乙基辛烷	951	952	952	950	950	反-4-甲基-2-戊烯	570	592	590	655	655
5-甲基壬烷	962	960	960	954	954	2-甲基-2-丁烯	522	573	561	670	670
4-乙基壬烷	1047	1041	1041	1044	1044	2-甲基-2-戊烯	607	654	642	735	735
5-甲基癸烷	1054	1049	1049	1050	1050	反-3-甲基-2-戊烯	612	662	650	758	756
4,5-二乙基辛烷	1096	1091	1092	1093	1093	顺-3-甲基-2-戊烯	615	672	660	769	766
4-乙基-5-甲基壬烷	1118	1112	1112	1117	1117	反-3-甲基-2-己烯	707	750	739		—
5,6-二甲基癸烷	1135	1129	1129	1131	1134	顺-3-甲基-2-己烯	710	757	715	-	
1-丁烯	393	436	426	496	500	反-3-甲基-3-己烯	695	735	731	812	810
1-戊烯	490	532	523	590	590	1,3-丁二烯	405	507	487	663	642
1-己烯	593	632	622	692	692	1,2-丁二烯	448	562	540	709	688
反-2-丁烯	412	464	450	542	545	2-甲基-1,3-丁二烯	507	624	602	795	770
顺-2-丁烯	427	481	468	576	576	3-甲基-1,2-丁二烯	531	634	612	770	716
反-2-戊烯	516	565	551	650	650	2-乙基-1,3-丁二烯	607	711	691	888	867
反-2-己烯	613	660	648	747	747	4-甲基-1,3-戊二烯	642	777	746	972	964
反-3-己烯	602	643	633	699	699	3-甲基-1,3-戊二烯	647	787	756	990	950
异丁烯	390	438	427	512	512						

表 13-157　C_4~C_8 烃保留指数[55]

(柱温：50 ℃)

化合物 \ 固定液 (I)	角鲨烷	Citroflex-A4	化合物 \ 固定液 (I)	角鲨烷	Citroflex-A4
反-2-丁烯	406.49	440.48	环戊烷	565.55	583.28
顺-2-丁烯	416.85	454.75	1-己烯	582.36	616.72
2-甲基-1-丁烯	473.11	475.06	3-甲基-反-2-戊烯	612.46	649.36
2-甲基-1-丁烯	488.48	525.41	3,4-二甲基-1-戊烯	636.80	667.52
2-甲基-2-丁烯	514.33	551.46	1-甲基环戊烯	644.55	680.48
2,2-二甲基丁烯	536.90	537.06	环己烷	662.78	677.10
环戊烯	549.62	596.27	2-甲基-3-乙基-1-戊烯	735.19	766.38

表 13-158　C_4~C_9 烃保留指数[31]

固定液	角鲨烷			乙酰基柠檬酸三丁酯		
柱温/℃	50	70	$\frac{\partial I}{\partial T}$	50	70	$\frac{\partial I}{\partial T}$
化合物 \ 保留指数	I			I		
反-2-丁烯	406.6	406.3	−0.015	440.9	440.3	−0.034
2,2-二甲基丙烷	412.3	412.9	0.030	412.4	414.4	0.102
顺-2-丁烯	416.9	417.3	0.017	454.5	451.3	−0.011
3-甲基-1-丁烯	450.3	450.8	0.025			−
2-甲基丁烷	475.3	475.5	0.007	475.2	475.8	0.028
1,反-2-二甲基环丙烷	479.2	479.8	0.028	-		−
戊烯-1	481.8	482.1	0.017	515.5	515.6	0.003
2-甲基-1-丁烯	488.0	488.1	0.005	525.2	524.9	−0.015
反-2-戊烯	500.0	499.8	−0.010	535.1	534.3	−0.041
顺-2-戊烯	504.9	505.1	0.010	542.2	542.0	−0.009
3,3-二甲基-1-丁烯	506.8	508.1	0.065	536.7	537.4	0.039
乙基环丙烷	510.2	511.5	0.066	—	-	-
3-甲基-1,2-丁二烯	510.3	509.9	−0.020	581.3	579.8	−0.073
2-甲基-2-丁烯	514.3	514.4	0.003	551.5	551.2	−0.019
1,顺-2-二甲基环丙烷	514.9	516.2	0.057	546.9	547.8	0.037
1,反-3-戊二烯	515.8	516.5	0.035	595.6	595.1	−0.024
1,2-戊二烯	525.6	525.9	0.016	598.5	597.2	−0.062
2,3-戊二烯	530.2	529.5	−0.032	603.5	601.1	−0.072
2,2-二甲基丁烷	536.8	538.5	0.082	536.9	538.6	0.084
1,1,2-三甲基环丙烷	549.2	550.3	0.054	—	—	−
4-甲基-1-戊烯	549.4	550.4	0.050	581.4	582.0	0.03
环戊烯	549.5	552.0	0.128	596.1	-	−
3-甲基-1-戊烯	551.4	553.0	0.079	582.1	583.4	0.063
4-甲基-顺-2-戊烯	556.2	556.6	0.024	589.1	589.1	−0.002
2,3-二甲基-1-丁烯	558.8	559.6	0.043	593.7	594.3	0.026
4-甲基-反-2-戊烯	561.9	561.6	0.013	593.5	592.7	−0.043
1,5-己二烯	562.9	563.7	0.040	631.4	631.7	0.017
环戊烷	565.7	568.5	0.138	583.2	586.2	0.147
2,3-二甲基丁烷	567.3	568.9	0.077	568.5	570.2	0.084
2-甲基戊烷	569.7	570.0	0.017	569.6	570.0	0.020
2-甲基-1-戊烯	580.1	580.6	0.022	616.7	616.7	0.002
1-己烯	582.3	582.7	0.024	616.9	617.1	0.000
3-甲基戊烷	584.2	585.1	0.015	585.3	586.3	0.048
2-乙基-1-丁烯	592.0	592.1	0.005	628.0	627.9	−0.009
反-3-己烯	592.1	591.6	−0.022	625.0	624.0	−0.052
顺-3-己烯	592.6	593.0	0.019	627.2	627.4	0.008
反-2-己烯	596.9	596.7	0.007	630.4	629.8	−0.063
2-甲基-2-戊烯	597.8	597.6	0.011	634.5	633.7	0.038

续表

固　定　液	角鲨烷			乙酰基柠檬酸三丁酯		
柱温/°C	50	70	$\frac{\partial I}{\partial T}$	50	70	$\frac{\partial I}{\partial T}$
化合物 \ 保留指数	*I*			*I*		
3-甲基-顺-2-戊烯	602.8	603.4	0.033	640.0	640.1	0.030
3-甲基环戊烯	603.2	605.1	0.143	646.3	648.7	0.120
顺-2-己烯	603.6	604.1	0.025	640.1	640.2	0.007
4,4-二甲基-1-戊烯	604.6	606.5	0.094	634.8	636.4	0.076
3-甲基-反-2-戊烯	612.7	612.9	0.008	649.4	649.2	−0.015
4,4-二甲基-反-2-戊烯	614.7	614.6	0.008	662.8	664.8	0.100
1,1,2,2-四甲基环丙烷	619.9	621.7	0.095	—	—	
乙基环丁烷	621.1	623.6	0.122	634.7	637.2	0.125
2,3-二甲基-2-丁烯	625.1	625.7	0.026	663.4	663.4	0.000
2,2-二甲基戊烷	625.6	627.0	0.065	625.7	627.0	0.065
3,3-二甲基-1-戊烯	626.2	628.5	0.117	656.0	658.1	0.106
甲基环戊烷	627.9	631.0	0.152	641.4	645.1	0.188
2,3,3-三甲基-1-丁烯	628.5	630.7	0.112	645.6	644.9	0.036
2,4-二甲基戊烷	629.8	630.5	0.035	629.9	630.5	0.032
4,4-二甲基-顺-2-戊烯	635.5	637.6	0.105	668.0	669.7	0.085
3,4-二甲基-1-戊烯	636.9	639.2	0.112	667.1	669.2	0.101
苯	637.2	641.8	0.232	775.6	779.4	0.190
2,4-二甲基-1-戊烯	637.7	639.0	0.065	671.9		—
2,2,3-三甲基丁烷	639.7	642.6	0.144	641.9	645.1	0.159
2,4-二甲基-2-戊烯	640.6	640.0	−0.030	674.8	673.5	−0.063
1-甲基环戊烯	644.5	646.8	0.165	689.3	691.2	0.093
3-甲基-1-己烯	644.7	646.0	0.068	675.6	676.6	0.055
3-乙基-1-戊烯	646.9	648.9	0.101	676.0	677.8	0.092
2-甲基-反-3-己烯	647.1	646.7	−0.019	676.8	675.7	−0.055
5-甲基-1-己烯	650.0	650.9	0.044	685.1	685.5	0.024
2,3-二甲基-1-戊烯	650.4	652.2	0.099	684.2	685.7	0.075
1-甲基-顺-2-己烯	654.9	656.1	0.060	686.5	687.4	0.046
4-甲基-反-2-己烯	656.7	657.4	0.038	684.2	687.1	0.115
4-甲基-1-己烯	657.9	659.3	0.063	691.2	692.2	0.052
3,3-二甲基戊烷	658.9	661.5	0.132	660.6	663.1	0.144
3-甲基-2-乙基-1-丁烯	659.1	659.9	0.040	692.3	692.7	0.022
5-甲基-反-2-己烯	659.5	659.8	0.015	—		-
环己烷	662.7	667.2	0.222	677.0	681.6	0.234
2-甲基己烷	666.6	667.0	0.017	666.9	667.2	0.013
3,4-二甲基-顺-2-戊烯	670.6	671.5	0.044	713.0	713.0	0.001
2,3-二甲基戊烷	671.7	673.4	0.085	673.9	675.8	0.094
1,1-二甲基环戊烷	673.5	677.1	0.183	685.9	689.6	0.187
3-甲基己烷	676.2	676.9	0.036	677.1	678.1	0.035
2-甲基-1-己烯	678.1	678.5	0.023	715.3	715.3	0.004
3,4-二甲基-反-2-戊烯	678.3	678.8	0.029	712.9	712.9	−0.001
2-乙基-1-戊烯	681.8	682.3	0.025	716.6	716.7	0.006
1-庚烯	681.8	682.3	0.025	717.2	717.3	0.008
1,顺-3-二甲基环戊烷	682.7	685.9	0.163	—	—	
3-甲基-顺-3-己烯	684.6	685.0	0.020	726.4	725.7	−0.036
3-乙基戊烷	686.0	687.2	0.057	688.9	690.0	0.055
1,反-3-二甲基环戊烷	686.8	690.1	0.165	—		—
反-3-庚烯	687.5	687.4	0.006	719.3	718.6	−0.032
1,反-2-二甲基环戊烷	689.2	692.4	0.159	699.7	702.8	0.152
2,2,4-三甲基戊烷	689.9	692.0	0.109	690.6	692.0	0.068
顺-3-庚烯	690.4	691.1	0.034	724.7	724.9	0.012
2-甲基-2-己烯	691.2	691.2	0.002	727.2	726.7	−0.025
3-甲基-反-3-己烯	691.2	691.1	−0.009	720.7	720.5	0.010

续表

固定液	角鲨烷			乙酰基柠檬酸三丁酯		
柱温℃	50	70	$\frac{\partial I}{\partial T}$	50	70	$\frac{\partial I}{\partial T}$
化合物 \ 保留指数	I			I		
2,2-二甲基-反-3-己烯	692.8	692.4	−0.020	720.7	719.5	−0.057
3-甲基-顺-2-己烯	693.3	691.1	0.045	729.4	729.8	0.023
2,5-二甲基-反-3-己烯	695.1	694.7	−0.021	720.6	719.5	−0.054
3-乙基-2-戊烯	697.2	697.7	0.030	733.4	733.4	0.002
反-2-庚烯	698.4	698.5	0.001	732.1	731.7	−0.022
2,3-二甲基-2-戊烯	703.4	704.2	0.038	741.4	741.8	0.020
2,4,4-三甲基-1-戊烯	704.3	706.8	0.045	736.0	738.3	0.117
3-乙基环戊烯	712.4	715.8	0.171	754.9	757.9	0.166
2,4,4-三甲基-2-戊烯	715.4	716.3	0.044	749.7	749.9	0.013
2,2-二甲基-顺-3-己烯	716.8	718.8	0.103	746.9	748.6	0.083
2,2-二甲基己烷	719.4	720.5	0.052	720.7	721.6	0.047
1,顺-2-二甲基环戊烷	720.9	725.1	0.209	734.6	738.9	0.212
1,1,3-三甲基环戊烷	723.6	727.5	0.191	731.3	735.1	0.190
甲基环己烷	725.8	730.6	0.243	736.3	741.5	0.257
2,5-二甲基己烷	728.4	729.0	0.030	729.5	729.7	0.010
2,4-二甲基己烷	731.9	733.0	0.051	733.5	734.6	0.053
乙基环戊烷	733.8	737.5	0.183	746.9	750.8	0.196
2,2,3-三甲基-1-戊烯	734.6	738.3	0.189	768.3	772.0	0.183
2-甲基-3-乙基-1-戊烯	735.0	737.4	0.118	766.2	768.5	0.103
2,2,3-三甲基戊烷	737.1	740.2	0.152	740.7	743.9	0.164
2,5-二甲基-1-己烯	739.3	740.9	0.081	773.2	774.5	0.067
1,反-2,顺-4-三甲基环戊烷	741.1	744.5	0.169	746.5	750.1	0.178
2-甲基-反-3-庚烯	741.1	741.2	0.003	769.4	768.8	−0.030
3,3-二甲基己烷	743.5	745.9	0.121	745.2	747.8	0.129
甲苯	745.4	750.2	0.240	876.8	881.1	0.215
3,4,4-三甲基-顺-2-戊烯	747.1	748.8	0.084	782.0	783.1	0.053
1,反-2,顺-3-三甲基环戊烷	747.8	751.1	0.165	755.4	758.8	0.167
2,5-二甲基-2-己烯	749.9	750.6	0.034	783.8	783.7	−0.002
2,3,4-三甲基戊烷	752.4	755.1	0.138	756.3	759.2	0.146
2,3,3-三甲基戊烷	759.1	763.4	0.202	763.6	767.9	0.218
2,3-二甲基己烷	760.1	761.5	0.072	762.8	764.3	0.072
2-甲基-3-乙基戊烷	761.4	763.5	0.107	—	—	—
1,1,2-三甲基环戊烷	763.2	767.9	0.232	773.4	773.9	0.026
2-甲基庚烷	764.9	765.2	0.015	765.1	765.4	0.013
2,3,4-三甲基-2-戊烯	765.9	766.8	0.041	802.2	802.2	0.005
4-甲基庚烷	767.2	767.7	0.026	768.6	768.7	0.003
3,4-二甲基己烷	770.6	772.6	0.099	773.9	776.0	0.104
3-甲基庚烷	772.3	772.9	0.031	774.0	774.5	0.029
2,2,4,4-四甲基戊烷	772.7	776.4	0.187	—	—	—
1,顺-2,反-4-三甲基环戊烷	773.1	777.4	0.218	781.7	786.1	0.223
3-甲基-3-乙基戊烷	774.0	777.5	0.189	777.5	781.6	0.203
2,2,5-三甲基己烷	773.3	777.5	0.062	778.7	779.7	0.051
2-甲基-3-乙基-2-戊烯	778.4	780.0	0.082	765.5	767.6	0.109
1-辛烯	781.2	781.7	0.028	816.8	817.0	0.011
反-4-辛烯	783.6	783.9	0.014	814.3	814.1	−0.012
1,顺-3-二甲基环己烷	785.0	789.9	0.242	791.6	796.7	0.255
1,1-二甲基环己烷	787.0	792.8	0.291	799.0	805.0	0.252
2,3-二甲基-2-己烯	788.8	790.2	0.072	825.9	826.4	0.025

续表

固定液	角鲨烷			乙酰基柠檬酸三丁酯		
柱温/℃	50	70	$\frac{\partial I}{\partial T}$	50	70	$\frac{\partial I}{\partial T}$
保留指数 / 化合物	*I*			*I*		
2,2,4-二甲基己烷	789.1	791.7	0.132	791.3	794.0	0.138
1-甲基-顺-3 乙基环戊烷	790.3	794.1	0.192		—	-
反 2 辛烯	797.7	797.7	0.000	831.9	831.4	-0.024
1,反 2 二甲基环己烷	801.8	807.5	0.287	810.2	816.3	0.307
1,顺-2,顺-3 三甲基环戊烷	802.2	807.7	0.275	812.8	818.5	0.288
1,顺-4 二甲基环己烷	805.2	810.5	0.267	816.8	822.2	0.272
1,反-3 二甲基环己烷	805.6	810.8	0.261	817.8	823.0	0.260
2,4,4-三甲基己烷	807.7	810.8	0.157	810.1	813.4	0.166
2,3,5 三甲基己烷	812.0	813.7	0.084	815.4	817.0	0.081
异丙基环戊烷	812.1	817.1	0.247	823.4	828.6	0.264
2,2 二甲基庚烷	815.4	816.5	0.051	816.7	817.6	0.044
2,2,3,4-四甲基戊烷	819.6	824.0	0.218	826.0	830.6	0.231
1-甲基-顺-2 乙基环戊烷	821.0	825.6	0.233	834.0	838.8	0.240
2,2,3 三甲基己烷	821.6	824.3	0.138	826.3	829.0	0.139
2,2 二甲基-3-乙基戊烷	822.2	826.2	0.200	826.8	831.0	0.210
1,顺 2 二甲基环己烷	829.3	835.4	0.307	842.2	—	
正丙基环戊烷	830.3	834.0	0.184	843.2	847.0	0.193
乙基环己烷	834.3	839.7	0.269	845.7	851.3	0.278
乙苯	834.6	839.8	0.262	-	—	
3,3 二甲基庚烷	835.8	838.0	0.110	839.1	841.3	0.109
2,4-二甲基-3-乙基戊烷	836.5	839.9	0.171	841.7	845.4	0.183
1,1,3 三甲基环己烷	840.4	846.0	0.282	850.2	855.9	0.286
2,3,4-三甲基己烷	849.1	852.0	0.146	854.8	857.9	0.156
1,4 二甲苯	849.1	854.0	0.247	—	—	
2,2,3,3-四甲基戊烷	852.1	857.5	0.272	860.6	866.4	0.290
2,3,3,4-四甲基戊烷	858.0	863.2	0.257	865.7	871.3	0.278
邻二甲苯	869.6	875.3	0.285	—	—	
3 甲基辛烷	870.2	870.7	0.030	871.7	872.3	0.028
3,3-二乙基戊烷	877.2	882.4	0.262	882.5	888.3	0.286

表 13-159 C_4~C_{10}烃保留指数[102]

固定液：OV-101

柱温/℃ / *I* / 化合物	50	70	柱温/℃ / *I* / 化合物	50	70
正丁烷	400.0	400.0	2,4-二甲基戊烷	630.3	631.4
2-甲基丁烷	474.4	474.6	2,2,3-三甲基丁烷	636.7	640.0
正戊烷	500.0	500.0	苯	651.2	655.2
2,2 二甲基丁烷	536.2	538.0	3,3-二甲基戊烷	655.9	659.1
环戊烷	565.5	568.9	环己烷	660.7	665.3
2,3-二甲基丁烷	565.5	569.0	2-甲基己烷	667.2	667.4
2 甲基戊烷	568.8	569.0	2,3-二甲基戊烷	669.6	671.4
3-甲基戊烷	583.6	584.3	1,1-二甲基环戊烷	673.2	676.7
正己烷	600.0	600.0	3 甲基己烷	675.0	676.7
2,2-二甲基戊烷	624.5	625.9	1,顺 3 二甲基环戊烷	683.2	686.6
甲基环戊烷	628.2	631.4	3-乙基戊烷	686.0	686.6

续表

柱温/℃ I 化合物	50	70
1,反-3-二甲基环戊烷	686.0	689.5
1,反-2-二甲基环戊烷	688.6	692.1
正庚烷	700.0	700.0
甲基环己烷	721.1	726.3
1,顺-2-二甲基环戊烷	721.1	726.3
2,2-二甲基己烷	723.4	724.5
1,1,3-三甲基环戊烷	723.4	726.3
乙基环戊烷	731.5	735.4
2,5-二甲基己烷	731.5	732.2
2,4-二甲基己烷	733.6	735.4
1,反-2,顺-4-三甲基环戊烷	739.8	743.2
3,3-二甲基己烷	741.0	743.2
1,反-2,顺-3-三甲基环戊烷	746.8	750.2
2,3,4-三甲基戊烷	749.1	752.6
甲基苯	753.5	757.8
2,3-二甲基己烷	759.9	761.5
2-甲基-3-乙基戊烷	760.9	763.6
1,1,2-三甲基环戊烷	760.9	766.3
2-甲基庚烷	766.0	766.4
1,顺-2,反-4-三甲基环戊烷	766.0	771.1
4-甲基庚烷	767.3	767.9
3,4-二甲基己烷	768.8	771.1
1,顺-2,顺-4-三甲基环戊烷	771.7	773.9
3-甲基庚烷	773.3	773.9
3-乙基己烷	773.3	773.9
1,顺-2,反-3-三甲基环戊烷	773.3	780.3
1,顺-3-二甲基环己烷	775.0	780.3
1,反-4-二甲基环己烷	776.8	782.2
1,1-二甲基环己烷	781.9	788.2
1-甲基-顺-3-乙基环戊烷	785.4	789.5
2,2,5-三甲基己烷	783.9	785.1
1-甲基-反-3-乙基环戊烷	787.1	791.7
1-甲基-反-2-乙基环戊烷	788.7	793.0
1-甲基-1-乙基环戊烷	790.7	795.7
2,2,4-三甲基己烷	790.7	793.0
1,反-2-二甲基环己烷	793.5	800.0
正辛烷	800.0	800.0
1,反-3-二甲基环己烷	800.0	805.9
1,顺-4-二甲基环己烷	800.0	805.9
1,顺-2,顺-3-三甲基环戊烷	800.0	803.5
异丙基环戊烷	807.2	812.4
2,4,4-三甲基己烷	807.2	809.8
2,3,5-三甲基己烷	812.9	815.8
1-甲基-顺-2-乙基环戊烷	816.3	821.8
2,2-二甲基庚烷	818.9	819.8
2,4-二甲基庚烷	822.6	823.6
2,2,3-三甲基己烷	822.6	823.6
1,顺-2-二甲基环己烷	822.6	830.0
2-甲基-4-乙基己烷	825.1	828.5
乙基环己烷	827.6	833.3
2,6-二甲基庚烷	829.5	830.0
正丙基环戊烷	827.6	831.3
1,1,3-三甲基环己烷	832.8	838.6
1,顺-3,顺-5-三甲基环己烷	832.8	838.6
2,5-二甲基庚烷	835.8	836.7
3,5-二甲基庚烷	837.3	838.6
1,1,4-三甲基环己烷	834.9	841.0
3,3-二甲基庚烷	839.1	841.0
2,3,3-三甲基己烷	840.4	841.0
乙基苯	844.6	849.4
3,3,4-三甲基己烷	845.8	849.4
2-甲基-3-乙基己烷	845.8	849.4
1,反-2,反-4-三甲基环己烷	847.1	853.0
2,3,4-三甲基己烷	847.1	852.9
1,顺-3,反-5-三甲基环己烷	850.9	856.0
1,3-二甲基苯	853.4	857.6
1,4-二甲基苯	854.3	857.6
2,3-二甲基庚烷	856.0	860.0
3-甲基-4-乙基己烷	856.0	860.0
3,4-二甲基庚烷	859.4	861.5
4-甲基辛烷	864.1	865.2
2-甲基辛烷	865.1	865.2
3-乙基庚烷	868.3	870.7
3-甲基辛烷	871.6	871.8
1,反-2,顺-4-三甲基环己烷	868.3	874.8
1,反-2,顺-3-三甲基环己烷	870.1	876.2
1,2-二甲基苯	874.1	879.5
1,顺-2,顺-4-三甲基环己烷	872.3	879.5
1,1,2-三甲基环己烷	874.1	881.5
1,顺-2,反-4-三甲基环己烷	875.5	881.5
1-甲基-顺-3-乙基环己烷	883.3	886.6
1-甲基-反-4-乙基环己烷	885.9	888.8
1,顺-2,反-3-三甲基环己烷	894.1	900.0
正壬烷	900.0	900.0
1,顺-2,顺-3-三甲基环己烷	895.7	903.1
1-甲基-反-2-乙基环己烷	897.4	904.9
1-甲基-反-3-乙基环己烷	897.4	904.9
1-甲基-1-乙基环己烷		907.6
1-甲基-顺-4-乙基环己烷		907.6
异丙基苯	—	911.1
3,3,5-三甲基庚烷	—	913.4
异丙基环己烷		916.9
1-甲基-顺-2-乙基环己烷	—	925.4
正丙基环己烷		926.9
正丙基苯		939.5
1-甲基-3-乙基苯	—	946.7

续表

柱温/℃ I 化合物	50	70	柱温/℃ I 化合物	50	70
1-甲基-4-乙基苯	—	948.5	1-甲基 2 乙基苯	—	963.0
1,3,5 三甲基苯		954.4	3-甲基壬烷	—	971.0
5 甲基壬烷		960.2	1,2,4-三甲基苯	—	977.7
4-甲基壬烷	—	963.0	正癸烷	1000.0	1000.0
2-甲基壬烷	—	964.6	1,2,3-三甲基苯	—	1010

表 13-160 C_4～C_{13}烃保留指数[96]

固定液：角鲨烷

化合物	I	柱温/℃	$\frac{\partial I}{\partial T}$	温度范围/℃	化合物	I	柱温/℃	$\frac{\partial I}{\partial T}$	温度范围/℃
2-甲基丙烷	364.6	50	0.03	50～75		638	30	—	—
	365.3	27	0.012	27～86		639.7	50	0.144	50～70
2,2 二甲基丙烷	410	30	—	—		642.59	70		
	410.6	30	0.0575	30～70	3,3-二甲基戊烷	656.0	30	0.145	30～70
	411.1	27	0.056	27～86		656.1	27	0.131	27～86
	412.3	50	0.03	50～70		657	30	—	—
2-甲基丁烷	473.8	30	0.0125	30～70		658.9	50	0.132	50～70
	474.0	27	0.041	27～86	2-甲基己烷	666	30	—	—
	474	30	—	—		665.2	30	0.015	30～70
	475.3	50	0.007	50～70		663.3	27	0.015	27～86
2,2 二甲基丁烷	535.0	30	0.08	30～70		665.6	50	0.017	50～70
	535	30	—	—	2,3-二甲基戊烷	669.6	30	0.1025	30～70
	535.1	27	0.083	27～86		670	30	—	—
	536.8	50	0.082	50～70		670.1	27	0.086	27～86
	538.46	70	—	—		671.7	50	0.085	50～70
2,3-二甲基丁烷	564	30	—	—	3-甲基己烷	675.5	30	0.035	30～70
	565.5	27	0.090	27～86		675.9	27	0.031	27～86
	565.6	30	0.103	30～70		676	30	—	·
	567.3	50	0.077	50～70		676.2	50	0.036	50～70
2-甲基戊烷	567	30	—	—		676.94	70		—
	569.2	30	0.0125	30～70	3-乙基戊烷	684.7	30	0.060	30～70
	569.7	50	0.017	50～70		684.8	27	0.064	27～86
	569.4	27	0.015	27～86		685	30	—	
3-甲基戊烷	583.1	27	0.058	27～86		686	50	0.057	50～70
	583	30	—	—	2,2,4-三甲基戊烷	687.7	30	0.1175	30～70
	583	30	0.05	30～70		687.9	27	0.108	27～86
	584.2	50	0.045	50～70		689	30	—	—
2,2 二甲基戊烷	624.1	27	0.078	27～86		689.9	50	0.109	50～70
	624.5	30	0.0675	30～70	2,2 二甲基己烷	718.2	27	0.047	27～86
	625	30	—	—		718.4	30	0.0575	30～70
	625.6	50	0.065	50～70		719	30	—	—
2,4 二甲基戊烷	629.1	27	0.034	27～86		719.4	50	0.052	50～70
	629.3	30	0.03	30～70		720.47	70	—	—
	629.8	50	0.035	50～70	2,2,3,3-四甲基丁烷	720.5	27	0.239	27～86
	630	30	·			720.7	30	0.26	30～70
2,2,3-三甲基丁烷	636.7	30	0.155	30～70	2,5 二甲基己烷	727.1	27	0.022	27～86
	636.8	27	0.149	27～86		727.9	30	0.03	30～70

续表

化合物	I	柱温/°C	$\frac{\partial I}{\partial T}$	温度范围/°C
2,3,4-三甲基戊烷	728	30	—	—
	728.4	50	0.030	50～70
2,4-二甲基己烷	730	30	—	-
	730.8	27	0.042	27～86
	731.1	30	0.0525	30～70
	731.9	50	0.051	50～70
2,2,3-三甲基戊烷	733.3	27	0.153	27～86
	734	30	0.165	30～70
	737.1	50	0.152	50～70
3,3-二甲基己烷	740.9	27	0.132	27～86
2,3,3-三甲基戊烷	740.11	70	—	—
3,3-二甲基己烷	741.1	30	0.13	30～70
	742	30	—	--
	743.5	50	0.003	50～70
2,3,4-二甲基戊烷	748.9	27	0.127	27～86
	749.5	30	0.15	30～70
	752.4	50	0.138	50～70
	754	27	0.202	27～86
2,3,3-三甲基戊烷	755.5	30	0.215	30～70
	756	30	—	--
	759.4	50	0.202	50～70
2-甲基-3-乙基戊烷	758.4	27	0.1	27～86
	758.4	30	0.135	30～70
	761.4	50	0.107	50～70
2,3-二甲基己烷	758.8	27	0.058	27～86
	759	30	0.07	30～70
	759	30	—	—
	760.1	50	0.072	50～70
2-甲基庚烷	763.6	27	0.017	27～86
	764.6	30	0.0275	30～70
	764.9	50	0.015	50～70
	765	30	—	--
4-甲基庚烷	766	27	0.015	27～86
	767	30	—	—
	767	30	0.025	30～70
	767.2	50	0.026	50～70
3,4-二甲基己烷	767.9	27	0.1	27～86
	768.7	30	0.1125	30～70
	769	30	—	—
2,2,4,4-四甲基戊烷	769.3	30	0.19	30～70
	772.7	50	0.187	50～70
3-甲基-3-乙基戊烷	770.4	30	0.2	30～70
	774	50	0.189	50～70
3,4-二甲基己烷	770.6	50	0.099	50～70
3-甲基庚烷	771.6	27	0.034	27～86
	772	30	—	—
	772.1	30	0.0375	30～70
	772.3	50	0.031	50～70
	772.92	70	—	—
3-乙基己烷	772.1	30	0.0375	30～70
2,2,5-三甲基己烷	775.4	30	0.065	30～70
	776.3	50	0.062	50～70
2,2,4-三甲基己烷	786.8	30	0.135	30～70
	789.1	50	0.132	50～70
2,4,4-三甲基己烷	805	30	0.16	30～70
	807.7	50	0.157	50～70
2,3,5-三甲基己烷	810.7	30	0.085	30～70
	812	50	0.084	50～70
2,2-二甲基庚烷	814.9	30	0.045	30～70
	815.4	50	0.051	50～70
2,2,3,4-四甲基戊烷	815.6	30	0.225	30～70
	819.6	50	0.218	50～70
2,2-二甲基-3-乙基戊烷	818	30	0.21	30～70
	822.2	50	0.2	50～70
2,2,3-三甲基己烷	818.7	30	0.16	30～70
	821.6	50	0.138	50～70
2,4-二甲基庚烷	821.1	30	0.02	30～70
2-甲基-4-乙基己烷	823.2	30	0.055	30～70
4,4-二甲基庚烷	825.3	30	0.115	30～70
2,6-二甲基庚烷	826.7	30	0.025	30～70
2,5-二甲基庚烷	832.3	30	0.03	30～70
3,5-二甲基庚烷	832.6	30	0.055	30～70
2,4-二甲基-3-乙基戊烷	832.8	30	0.18	30～70
	836.5	50	0.171	50～70
3,3-二甲基庚烷	833.8	30	0.115	30～70
	835.8	50	0.110	50～70
2,3,3-三甲基己烷	836.3	30	0.185	30～70
2-甲基-3-乙基己烷	841.6	30	0.105	30～70
2,3,4-三甲基己烷	843.4	30	0.16	30～70
2,2,3,3-四甲基戊烷	847.3	30	0.27	30～70
	852.1	50	0.272	50～70
3,3,4-三甲基己烷	848.7	30	0.22	30～70
2,3,4-三甲基己烷	849.1	50	0.146	50～70
3-甲基-3-乙基己烷	850	30	0.175	30～70
3-甲基-4-乙基己烷	851.7	30	0.155	30～70
2,3-二甲基庚烷	853.5	30	0.065	30～70
2,3,3,4-四甲基戊烷	853.6	30	0.256	30～70
3,4-二甲基庚烷	856.3	30	0.0925	30～70
4-乙基庚烷	856.6	30	0.045	30～70
2,2,3,4-四甲基戊烷	858.7	50	0.257	50～70
4-甲基辛烷	862.3	30	0.03	30～70
2-甲基辛烷	864.4	30	0.015	30～70
3-乙基庚烷	866	30	0.0425	30～70
2,3-二甲基-3-乙基戊烷	866.9	30	0.27	30～70
3-甲基辛烷	869.6	30	0.035	30～70
	870.2	50	0.030	50～70

续表

化合物	I	柱温/℃	$\frac{\partial I}{\partial T}$	温度范围/℃
3,3-二乙基戊烷	871.8	30	0.29	30～70
	877.2	50	0.262	50～70
乙烯	177.4	27	0.017	27～86
丙烯	283.3	50	—	50～75
	286.7	27	0.015	27～86
丙二烯	317	27	0.047	27～86
1-丁烯-3-炔	372.9	27	0.019	27～86
甲基丙烯	383.2	27	0.005	27～86
1 丁烯	384.4	50	0.0085	50～75
	384.8	27	0.007	27～86
1,3-丁二烯	385.6	50	0.012	50～75
	385.8	27	0.037	27～86
反-2-丁烯	406.6	50	−0.015	50～70
	406.7	27	−0.003	27～86
顺 2 丁烯	416.5	27	0.019	27～86
	416.9	50	0.017	50～70
甲基-1 环丙烯	426.5	20		—
1,2 丁二烯	429.4	27	0.005	27～86
环丁烯	431.7	27	0.041	27～86
3 甲基-1-丁烯	449.2	27	0.047	27～86
	450.3	50	0.025	50～70
2 甲基 1-丁烯-3-炔	456.5	27	0.01	27～86
	163.3	27	0.041	27～86
1,4-戊二烯	481.0	27	0.036	27～86
1 戊烯	181.8	50	0.017	50～70
2 甲基-1-丁烯	488.0	50	0.005	50～70
	488.1	27	0.008	27～86
异戊二烯	496.4	27	0.080	27～86
反 2 戊烯	501.2	27	0.025	27～86
顺 2 戊烯	504.9	50	0.01	50～70
	505.1	27	0.029	27～86
3,3-二甲基 1 丁烯	505.5	27	0.075	27～86
	506.8	50	0.065	50～70
3 甲基 1,2-丁二烯	510.3	50	0.020	50～70
	511.6	27	0.014	27～86
2 甲基 2-丁烯	513.9	27	0.027	27～86
	514.3	50	0.003	50～70
1,反-3-戊二烯	515.8	50	0.035	50～70
	515.1	27	0.063	27～86
1,3-环戊二烯	518.6	27	0.190	27～86
1,顺 3-戊二烯	523.9	27	0.080	27～86
1,2 戊二烯	525.9	27	0.034	27～86
	525.6	50	0.016	50～70
2,3-戊二烯	530.2	50	−0.032	50～70
	532.0	27	0.032	27～86
3-甲基 1,4 戊二烯	530.8	27	0.068	27～86
环戊烯	546.7	27	0.151	27～86
	549.5	50	0.128	50～70
4-甲基-1-戊烯	548.6	27	0.058	27～86
	549.4	50	0.050	50～70
3-甲基-1 戊烯	550.0	27	0.081	27～86
	551.4	50	0.079	50～70
4-甲基 顺 2-戊烯	555.7	27	0.036	27～86
	556.2	50	0.024	50～70
2,3 二甲基-1-丁烯	557.6	27	0.069	27～67
	558.8		0.043	50～70
4-甲基 反 2 戊烯	561.9	50	−0.013	50～70
	562.0	27	0.012	27～67
1,5-己二烯	562.9	50	0.040	50～70
	563.3	27	0.041	27～86
2 甲基-1-戊烯	579.8	27	0.034	27～86
	580.1	50	0.022	50～70
1-己烯	581.8	27	0.049	27～86
	582.3	50	0.024	50～70
	583.1	86	0.03	86～115
1,反 4 己二烯	582.9	27	0.005	27～86
1,顺-4 己二烯	587.8	27	0.032	27～86
反-3 己烯	591.4	86	-0.03	86～115
	592.1	50	−0.022	50～70
	593.5	27	0.029	27～86
2-乙基-1-丁烯	591.8	27	0.029	27～86
	592	50	0.005	50～70
顺-3-己烯	592.4	27	0.024	27～86
	592.6	50	0.019	50～70
	593.0	86	0.02	86～115
反-2-己烯	596.7	86	−0.01	86～115
	596.9	50	−0.007	50～70
	597.3	27	0.002	27～86
2 甲基-2-戊烯	597.8	50	−0.011	50～70
	598	27	0.010	27～86
2-乙基-1,3-丁二烯	598.6	27	0.032	27～86
2-甲基-1,顺 3 戊二烯	600.4	27	0.031	27～86
3 甲基环戊烯	600.6	27	0.158	27～86
	603.2	50	0.143	50～70
3-甲基 顺 2 戊烯	602.3	27	0.042	27～86
	602.8	50	0.033	50～70
4,4-二甲基-1-戊烯	603.1	27	0.092	27～86
	604.6	50	0.094	50～70
顺 2 己烯	603.5	27	0.036	27～86
	603.6	50	0.025	50～70
	601.6	86	0.02	86～115
2,3-二甲基-1,3-丁二烯	610.4	27	0.037	27～86
1,反-3-己二烯	612.5	27	0.047	27～86
3 甲基-反-2-戊烯	612.7	50	0.008	50～70
	612.9	27	0.015	27～86
4,4-二甲基 反 2 戊烯	614.7	50	−0.008	50～70
	615.4	27	−0.020	27～86

续表

化合物	I	柱温/℃	$\frac{\partial I}{\partial T}$	温度范围/℃
2-甲基-1,3-环戊二烯	621.0	27	0.149	27～86
1,顺-3-己二烯	622.5	27	−0.032	27～86
1-甲基-1,3-环戊二烯	622.9	27	0.139	27～67
3,3-二甲基-1-戊烯	623.9	27	0.141	27～86
2,3-二甲基-2-丁烯	624.9	27	0.042	27～86
	625.1	50	0.026	50～70
2,3,3-三甲基-1-丁烯	625.8	27	0.131	27～86
3,3-二甲基-1-戊烯	626.2	50	0.117	50～70
2-甲基-1,反-3-戊二烯	626.4	27	0.058	27～86
4-甲基-1,3-戊二烯	627.9	27	0.047	27～86
2,3,3-三甲基-1-丁烯	628.5	50	0.112	50～70
4,4-二甲基-顺-2-戊烯	633.3	27	0.1	27～86
	635.5	50	0.105	50～70
3,4-二甲基-1-戊烯	634.9	27	0.122	27～86
	636.9	50	0.112	50～70
2,4-二甲基-1-戊烯	636.2	27	0.075	27～86
	637.7	50	0.065	50～70
3-甲基-1,顺-3-戊二烯	637.2	27	0.071	27～86
3-甲基-1,反-3-戊二烯	640.3	27	0.103	27～86
2,4-二甲基-2-戊烯	640.6	50	0.030	50～70
	641.4	27	−0.017	27～86
1-甲基-环戊烯	642.2	27	0.136	27～86
	644.5	50	0.165	50～70
3-甲基-1-己烯	643.0	27	0.093	27～86
	644.7	50	0.068	50～70
反-2,反-4-己二烯	645.1	27	+0.041	27～86
3-乙基-1-戊烯	615.3	27	0.115	27～86
	646.9	50	0.101	50～70
2-甲基-反-3-己烯	647.1	50	−0.019	50～70
	648.0	27	0.015	27～86
2,3-二甲基-1-戊烯	648.6	27	0.112	27～86
	650.4	50	0.099	50～70
1,3-环己二烯	649.1	27	0.244	27～86
5-甲基-1-己烯	649.3	27	0.051	27～86
	650.0	50	0.044	50～70
顺-2,反-4-己二烯	653.2	27	0.041	27～86
4-甲基-顺-2-己烯	654.1	27	0.071	27～86
	654.9	50	0.060	50～70
1-甲基-反-2-己烯	656.1	27	0.042	27～86
	656.7	50	0.038	50～70
4-甲基-1-己烯	657.2	27	0.064	27～86
	657.9	50	0.063	50～70
3-甲基-2-乙基-1-丁烯	658.6	27	0.047	27～86
	659.1	50	0.040	50～70
5-甲基-反-2-己烯	659.5	50	0.015	50～70
	659.7	27	0.0_5	27～86
2-甲基-1,5-己二烯	660.7	27	0.037	27～86
顺-2,顺-4-己二烯	661.3	27	0.041	27～86
1,6-庚二烯	662.8	27	0.046	27～86

化合物	I	柱温/℃	$\frac{\partial I}{\partial T}$	温度范围/℃
环己烯	666.9	27	0.215	27～86
3,4-二甲基-顺-2-戊烯	669.9	27	0.056	27～86
	670.6	50	0.044	50～70
2-甲基-1-己烯	677.8	27	0.015	27～86
	678.1	50	0.023	50～70
3,4-二甲基-反-2-戊烯	678.3	50	0.029	50～70
	678.4	27	0.027	27～86
1-庚烯	681.5	27	0.017	27～86
	681.8	50	0.025	50～70
	682.8	86	0.02	86～115
2-乙基-1-戊烯	681.8	50	0.025	50～70
	682.3	27	0.022	27～86
3-甲基-顺-3-己烯	684.6	50	0.020	50～70
3-甲基-反-3-己烯	684.8	27	0.022	27～86
1,4-环己二烯	685.0	27	0.236	27～86
2,4-二甲基-1,3-戊二烯	686.5	27	0.031	27～86
反-3-庚烯	687.5	50	−0.006	50～70
	687.5	86	0.00	86～115
	688.1	27	−0.005	27～86
顺-3-庚烯	690.2	27	0.037	27～86
	690.4	50	0.034	50～70
	691.7	86	0.02	86～115
2-甲基-2-己烯	691.2	50	0.002	50～70
3-甲基-反-3-己烯	691.2	50	0.009	50～70
3-甲基-顺-3-己烯	691.7	27	−0.019	27～86
2-甲基-2-己烯	691.9	27	−0.005	27～86
3-甲基-反-2-己烯	692.7	27	0.054	27～86
2,2-二甲基-反-3-己烯	692.8	50	−0.020	50～70
3-甲基-顺-2-己烯	693.3	50	0.045	50～70
2,5-二甲基-反-3-己烯	695.1	50	0.071	50～70
3-乙基-2-戊烯	697.2	50	0.03	50～70
	697.3	27	0.027	27～86
反-2-庚烯	698.4	50	0.001	50～70
	698.7	86	0.00	86～115
	699.2	27	−0.005	27～86
3-甲基-顺-2-己烯	700.6	27	0.019	27～86
2,4,4-三甲基-2-戊烯	701.4	27	0.141	27～86
	715.4	50	0.044	50～70
2,3-二甲基-2-戊烯	702.5	27	0.061	27～86
	703.4	50	0.038	50～70
顺-2-己烯	702.9	27	0.037	27～86
	704.3	86	0.03	86～115
2,4,4-三甲基-1-戊烯	704.3	50	0.045	50～70
3-乙基环戊烯	709.5	27	0.175	27～86
	712.4	50	0.171	50～70
2,2-二甲基-顺-3-己烯	716.8	50	0.103	50～70
3-甲基环己烯	728.2	27	0.249	27～86

续表

化合物	I	柱温/℃	$\frac{\partial I}{\partial T}$	温度范围/℃
4-甲基环己烯	728.2	27	0.249	27～86
2,2,3-三甲基-1-戊烯	734.6	50	0.189	50～70
2-甲基-3-乙基-1-戊烯	735.0	50	0.118	50～70
2,3-二甲基-1-己烯	739.3	50	0.081	50～70
2-甲基-反-3-庚烯	741.1	50	0.003	50～70
1-乙基-环戊烯	744.3	27	0.12	27～86
3,4,4-三甲基-顺-2-戊烯	747.1	50	0.084	50～70
2,5-二甲基-2-己烯	749.9	50	0.034	50～70
1,3,5-环庚三烯	755.5	27	0.327	27～86
1-甲基环己烯	757.3	27	0.214	27～86
2,3,4-三甲基-2-戊烯	765.9	50	0.041	50～70
3,4-二甲基-反-3-己烯	774.3	27	0.076	27～86
2-甲基-3-乙基-2-戊烯	778.4	50	0.082	50～70
1-甲基-1,4-环己二烯	779.9	27	0.249	27～86
1-辛烯	781.2	50	0.028	50～70
	782.3	86	0.02	86～115
3,4-二甲基-顺-3-己烯	782.2	27	0.064	27～86
反-1-辛烯	783.6	50	0.014	50～70
	784.2	86	0.00	86～115
顺-4-辛烯	787.9	86	0.02	86～115
反-3-辛烯	788.4	86	-0.01	86～115
顺-3-辛烯	789.5	86	0.02	86～115
2,3-二甲基-2-己烯	788.8	50	0.072	50～70
反-2-辛烯	797.7	86	-0.01	86～115
	797.7	50	0.0004	50～70
顺-2-辛烯	802.8	86	0.03	86～115
1-壬烯	882.2	86	0.02	86～115
反-4-壬烯	884.2	86	-	86～115
顺-4-壬烯	884.8	86	0.04	86～115
反-3-壬烯	886.6	86	-	86～115
顺-3-壬烯	887	86	0.04	86～115
反-2-壬烯	896.6	86	—	86～115
顺-2-壬烯	901.5	86	0.04	86～115
1,5-环辛二烯	903.1	49	0.39	49～86
顺-5-癸烯	981	86	0.04	86～115
顺-4-癸烯	982.2	86	0.04	86～115
反-4-癸烯	982.2	86	0.02	86～115
1-癸烯	982.2	86	0.02	86～115
反-5-癸烯	984	86	0.02	86～115
反-3-癸烯	985.4	86	—	86～115
顺-3-癸烯	985.4	86	0.03	86～115
反-2-癸烯	996.7	86		86～115
顺-2-癸烯	1001.2	86	0.03	86～115
顺-5-十一烯	1077.6	86	0.04	86～115
	1080.5	130	0.1	115～130
顺-4-十一烯	1079.9	86	0.04	86～115
	1082.5	130	0.09	115～130
反-4-十一烯	1081.0	86	0.007	86～115
	1082.5	130	0.09	115～130
反-5-十一烯	1081.6	86	0.01	86～115
	1083.5	130	0.1	115～130
1-十一烯	1082.2	86	0.01	86～115
	1083.5	130	0.06	115～130
顺-3-十一烯	1081.7	86	0.04	86～115
	1086.6	130	0.05	115～130
反-3-十一烯	1085.5	86	-0.007	86～115
	1085.5	130	-0.1	115～130
反-2-十一烯	1096.6	86	-	86～115
	1096.7	130	0.01	115～130
顺-2-十一烯	1101.1	86	0.03	86～115
	1102.7	130	0.05	115～130
顺-6-十二烯	1173.8	86	0.08	86～115
	1179.6	130	0.06	115～130
顺-5-十二烯	1174.6	86	0.07	86～130
顺-4-十二烯	1178.7	86	0.07	86～130
反-6-十二烯	1178.7	86	0.06	86～100
反-5-十二烯	1179.8	86	0.06	86～100
	1180.6	100	0.03	100～130
反-4-十二烯	1180.1	86	0.03	86～130
1-十二烯	1182.5	86	0.04	86～100
	1183.0	100	0.04	100～130
顺-3-十二烯	1184.1	86	0.07	86～100
	1185.1	100	0.04	100～115
	1185.7	115	0.03	115～130
反-3-十二烯	1185	86	0.007	86～130
反-2-十二烯	1196.9	86		86～115
	1196.9	115	-0.007	115～130
顺-2-十二烯	1201.1	86	0.04	86～115
	1202.3	115	0.03	115～130
顺-6-十三烯	1270.2	86	0.07	86～100
	1272.5	115	0.06	115～130
顺-5-十三烯	1272.8	86	0.07	86～100
	1275.0	115	0.06	115～130
反-6-十三烯	1276.7	86	0.05	86～130
顺-4-十三烯	1277.7	86	0.06	86～100
	1279.8	115	0.06	115～130
反-5-十三烯	1279	86	0.04	86～100
	1279.5	100	0.05	100～115
	1280.3	115	0.03	115～130
反-4-十三烯	1279.6	86	0.02	86～130
1-十二烯	1282.8	86	0.02	86～130
顺-3-十三烯	1283.7	86	0.05	86～115
	1285.1	115	0.03	115～130
反-3-十三烯	1284.9	86		86～100
	1284.9	100	0.01	100～115
	1285.1	115	—	115～130
反-2-十三烯	1296.9	86		86～115

续表

化合物	I	柱温/℃	$\frac{\partial I}{\partial T}$	温度范围/℃
顺-2-十三烯	1301	86	0.04	86～130
顺-7-十四烯	1366.7	100	0.09	100～130
顺-6-十四烯	1368.6	100	0.09	100～130
顺-5-十四烯	1372	100	0.086	100～130
反-7-十四烯	1374.5	100	0.06	100～130
反-6-十四烯	1375.7	100	0.06	100～130
顺-4-十四烯	1377.7	100	0.07	100～130
反-5-十四烯	1378.4	100	0.05	100～130
反-4-十四烯	1379.3	100	0.036	100～130
1-十四烯	1383.2	100	0.026	100～130
顺-3-十四烯	1384.1	100	0.04	100～130
反-3-十四烯	1384.6	100	0.01	100～130
反-2-十四烯	1396.9	100	0.003	100～130
顺-2-十四烯	1401.5	100	0.04	100～130
乙炔	155.1	27	0.000	27～86
丙炔	296.8	27	0.032	27～86
1-丁炔	385.4	27	0.000	27～86
2-丁炔	463.3	27	−0.007	27～86
1-戊炔	484.1	27	0.005	27～86
2-戊炔	549.4	27	−0.041	27～86
4-甲基-1-戊炔	551.6	27	0.024	27～86
1-己炔	585.5	27	0.020	27～86
3-己炔	629.7	27	−0.08	27～86
2-己炔	645.1	27	−0.041	27～86
5-甲基-1-己炔	653.6	27	0.051	27～86
1,6-庚二炔	663.6	27	−0.002	27～86
1-庚炔	686.5	27	−0.003	27～86
3-庚炔	723.4	27	−0.08	27～86
2-庚炔	746.8	27	−0.027	27～86
苯	634.3	27	0.247	27～86
	637.2	50	0.232	50～70
	641.8	70	0.232	50～70
	644.42	80	0.240	80
	646.6	86	0.240	86～115
	648.5	80	—	—
	650	92	—	—
	650.2	92	0.1579	92～130
甲苯	740.6	27	0.242	27～86
	745.4	50	0.24	50～70
	751.68	80	0.245	80
	754.2	86	0.22	86～115
	758	92	—	—
	758	92	0.1684	92～130
乙苯	829.9	27	0.28	27～86
	834.6	50	0.262	50～70
	841.56	80	0.265	80
	844.3	86	0.24	86～115
	847	92	—	
	847	92	0.1763	92～130

化合物	I	柱温/℃	$\frac{\partial I}{\partial T}$	温度范围/℃
对二甲苯	844.4	27	0.268	27～86
	849.1	50	0.217	50～70
	855.73	80	0.251	80
	858.1	86	0.23	86～115
	861	92		—
苯乙烯	856.6	27	0.300	27～86
	880	92	0.253	92～130
间二甲苯	846.7	27	0.264	27～86
	857.76	80	0.245	80
	860.3	86	0.23	86～115
	863	92	—	—
对二甲苯	861	92	0.1895	92～130
邻二甲苯	864.1	27	0.31	27～86
	869.6	50	0.285	50～70
	877.26	80	0.284	80
	880.1	86	0.27	86～115
	883	92	—	—
	883	92	0.2421	92～130
异丙基苯	901	80	0.264	80
	903.5	86	0.25	86～115
	906	92	0.2237	92～130
	907	92	—	—
正丙基苯	929.74	80	0.282	80
	932.6	86	0.26	86～115
	935	92	—	—
	935	92	0.1789	92～130
1-甲基-3-乙基苯	943.07	80	0.242	80
	948	92		—
	948	92	0.1397	92～130
间乙基甲苯	945.6	86	0.22	86～115
1-甲基-4-乙基苯	945.26	80	0.269	80
	950	92	—	—
对乙基甲苯	948	86	0.24	86～115
2-甲基苯乙烯	956	92	0.1737	92～130
1-甲基-2-乙基苯	958.25	80	0.282	80
	964	92	—	—
	964	92	0.2132	92～130
邻乙基甲苯	961.2	86	0.26	86～115
1,3,5-三甲基苯	962.70	80	0.239	80
	965.3	86	0.2	86～115
	968	92	—	—
	968	92	0.1579	92～130
叔丁基苯	967.08	80	0.290	80
	973	92	—	—
1,2,4-三甲基苯	979.70	80	0.288	80
	982.2	86	0.28	86～115
	986	92	—	—
异丁基苯	982.35	80	0.301	80
	989	92	—	—

续表

化合物	I	柱温/℃	$\frac{\partial I}{\partial T}$	温度范围/℃
仲丁基苯	983.15	80	0.308	80
	989	92		—
1-甲基-3-异丙基苯	997.41	80	0.216	80
	1002	92	—	—
	1002	92	0.2632	92～140
1,2,3-三甲基苯	1004.31	80	0.337	80
	1007.5	86	—	—
	1011	92	—	—
	1011	92	0.3158	92～110
1-甲基-4-异丙基苯	1004.39	80	0.267	80
	1010	93	—	—
	1010	92	0.2421	92～140
1-甲基-2-异丙基苯	1010.42	80	0.264	80
	1015	92	—	—
	1015	92	0.3316	92～140
茚满	1014	92	—	—
1,3-二乙基苯	1023.18	80	0.244	80
	1025.0	86	—	—
	1028	92	—	—
	1028	92	0.2105	92～140
	1032.95	80	0.289	80
1-甲基-3-丙基苯	1027.78	80	0.255	80
	1030.5	86	0.23	86～115
	1033	92	—	—
正丁基苯	1029.42	80	0.284	80
	1033	86	0.24	86～115
	1935	92	—	—
	1035	92	0.2474	92～140
1-甲基-4-丙基苯	1032.02	80	0.282	80
	1039	92	—	—
1,4-二乙基苯	1033.82	80	0.227	80
	1039	92	—	—
	1039	92	0.3632	92～140
1,2-二乙基苯	1036	86	0.26	86～115
	1039	92	—	—
	1039	92	0.3632	92～140
1-甲基-2-丙基苯	1039.41	80	0.298	80
	1042	86	0.29	—
	1045	92	—	—
1,3-二甲基 乙基苯	1043.46	80	0.218	80
1-甲基-2-正丙基苯	1045	92	0.1921	92～140
1,3-二甲基-5-乙基苯	1048	92	—	—
1-甲基-3-叔丁基苯	1051.12	80	0.236	80
1,4-二甲基-2-乙基苯	1054.29	80	0.260	80
	1060	92	0.3632	92～140
1,3-二甲基-4-乙基苯	1060.40	80	0.281	80
	1066	92	—	—
	1070.8	115	—	—
叔戊基苯	1062.21	80	0.369	80
1-甲基茚满	1063	92		
1,2-二甲基-4-乙基苯	1064.95	80	0.286	80
	1070	92	—	—
1,3-二甲基-2-乙基苯	1064.97	80	0.309	80
	1071	92	—	—
	1071	92	0.2789	92～140
1-甲基-4-叔丁基苯	1069.11	80	0.292	80
仲戊基苯	1071.59	80	0.286	80
1,2-二甲基-3-乙基苯	1080.77	80	0.329	80
	1087	92		—
2,5-二甲基苯乙烯	1091.4	140	—	
1,2,4,5-四甲基苯	1099.53	80	0.341	80
	1106	92	—	—
1,2,3,5-四甲基苯	1105.05	80	0.338	80
	1111	92	—	—
	1111	92	0.3395	92～140
2,6-二甲基苯乙烯	1107.1	140	—	—
1-乙基-2-丙基苯	1113.9	86	0.29	86～115
	1115	92	0.4368	92～140
1,3-二异丙基苯	1115.13	80	0.195	80
5-甲基茚满	1119	92		—
4-甲基茚满	1126	92	—	
戊基苯	1128.58	80	0.286	80
	1129.5	86	0.28	86～115
2,4-二甲基苯乙烯	1129.3	140	—	—
1,2,3,4-四甲基苯	1129.98	80	0.395	80
	1135	92	—	—
四氢萘	1137	92	—	—
1-甲基-2-丁基苯	1139.1	86	0.31	86～115
1,2-二甲基叔丁基苯	1150	92	0.2579	92～140
萘	1152	92	—	—
二异丙基苯	1152	92	0.2947	92～140
3-丙基-1,2-二甲基苯	1168.4	140		
1-甲基-5-乙基-2-丙基苯	1188.5	140		—
1-甲基-2-丙基-4-异丙基苯	1275.5	140	—	—
1-甲基-3,5-二异丙基苯	1291.7	140	—	—
环丙烷	343.6	27	0.064	27～86
	344.1	50	0.05	50～75
甲基环丙烷	414.5	20	—	—
亚甲基环丙烷	432.5	20	—	—
1,1-二甲基环丙烷	458.8	20	—	—
环丁烷	462.1	27	0.078	27～86
1,反-2-二甲基环丙烷	479.2	50	0.028	50～70
	479.4	27	0.027	27～86
反-1,2-二甲基环丙烷	481.0	20	—	
乙基环丙烷	508.3	20	—	—
1-甲基-反-2-(1-乙烯基)环丙烷	508.6	20	0.070	20～80

续表

化合物	I	柱温/℃	$\frac{\partial I}{\partial T}$	温度范围/℃
乙基环丙烷	508.6	27	0.149	27～86
	510.2	50	0.066	50～70
	511.53	70	—	—
1,顺-2-二甲基环丙烷	513.1	20	—	—
	513.9	27	0.068	27～86
	514.9	50	0.057	50～70
1-乙烯基环丙烷	515.6	20	—	-
亚甲基环丁烷	533.5	27	0.088	27～86
1,1,2-三甲基环丙烷	548.5	20	0.035	20～60
	548.6	27	0.058	27～86
	549.2	50	0.054	50～70
环戊烷	562.0	30	-	—
	562.9	27	0.154	27～86
	565.7	50	0.138	50～70
	568.49	70	—	-
1-甲基-1-乙基环丙烷	567.0	20	—	—
1-甲基-反-1-乙基环丙烷	568.0	20	—	—
异丙基环丙烷	569.8	27	0.124	27～86
1-(1-甲基)乙基环丙烷	569.9	20	—	—
2-丙烯基环丙烷	592.8	20	0.080	20～80
1-甲基-顺-2-乙基环丙烷	603.0	20	—	—
1-甲基-顺-2-(1-乙烯基)环丙烷	605.4	20	0.073	20～80
正丙基环丙烷	608.9	20	—	
2-丙基环丙烷	614.8	27	0.075	27～86
1,1,2,2-四甲基环丙烷	617.7	27	0.120	27～67
	619.9	50	0.095	50～70
乙基环丁烷	618.7	27	0.131	27～86
	621.1	50	0.122	50～70
	623.13	70	—	—
1,1,2,2-四甲基环丙烷	621.2	60	—	—
甲基环丙烷	624.3	27	0.195	27～86
	625.0	30	—	—
	627.9	50	0.152	50～70
	630.96	70	—	—
1-甲基-反-2-异丙基-环丙烷	624.8	60	-	--
(1,1-二甲基)乙基环丙烷	627.4	60	—	—
1,1-二甲基-2-乙基环丙烷	632.8	60	-	
反-1-丙烯基环丙烷	638.6	20	0.052	20～80
二环丙基环丙烷	640.2	20	0.10	20～80
顺-1-丙烯基环丙烷	613.2	20	0.060	20～80
1-甲基-(1-甲基)1-乙基环丙烷	646.0	60	—	
1,2-二甲基-反-2-乙基环丙烷	653.6	60	—	
1,2-二甲基-顺-2-乙基环丙烷	654.7	60	—	—
1-甲基-顺-2-异丙基环丙烷	658.4	60	-	—
环己烷	658.4	27	0.234	27～86
	659.0	30	—	--
	662.7	50	0.222	50～70
	667.10	70	—	—
反-1,2-二乙基环丙烷	662.8	60	—	—
1-甲基-1-丙基环丙烷	662.8	60	—	—
1-甲基-反-2-丙基环丙烷	668.0	60	—	—
1-(1-乙烯基)-反-2-乙基环丙烷	668.4	60	0.06	60～100
1,1-二甲基环丙烷	669.2	27	0.195	27～86
	670.0	30	—	—
	673.5	50	0.183	50～70
1,1-二乙基环丙烷	672.8	60	—	-
1,顺-3-二甲基环丙烷	679.4	27	0.169	27～86
	680.0	30	—	—
	682.7	50	0.163	50～70
(2-甲基)丙基环丙烷	680.6	60	--	
1,反-3-二甲基环丙烷	683.4	27	0.176	27～86
	684.0	30	—	—
	686.8	50	0.165	50～70
1,反-2-二甲基环丙烷	685.7	27	0.178	27～86
	686.0	30	—	-
	689.7	50	0.159	50～70
	692.38	70	-	-
1-甲基-顺-2-(2-丙烯基)环丙烷	687.9	60	0.13	60～80
顺-1,2-二乙基环丙烷	694.8	60		-
1-甲基-反-2-(1-顺-丙烯基)环丙烷	698.9	60	−0.07	60～80
1-甲基-顺-2-(2-丙烯基)环丙烷	690.5	80	0.055	80～100
3-丁烯环丙烷	694.2	80	—	
1-(1-乙烯基)-顺-2-乙基环丙烷	694.3	60	0.1	60～80
	696.3	80	0.065	80～100
1-甲基-反-2-(1-顺-丙烯基)环丙烷	697.5	80	0.02	80～100
1-甲基-顺-2-丙基环丙烷	702.2	60	-	—
1-甲基-反-2-(1-反-丙烯基)环丙烷	703.0	60	3.945	60～80
乙烯基环戊烷	710.1	27	0.197	27～86
正丁基环丙烷	712.5	60	0.06	60～80
反-2-丁烯基环丙烷	715.4	80	-	—
1,顺-2-二甲基环戊烷	716.0	30		
	716.6	27	0.210	27～86
	720.9	50	0.209	50～70

续表

化合物	I	柱温/℃	$\frac{\partial I}{\partial T}$	温度范围/℃
1,1,3-三甲基环戊烷	719.7	27	0.2	27～86
	723.6	50	0.191	50～70
1-甲基-顺-2-(1-反-丙烯基)环丙烷	719.7	80	0.035	80～100
甲基环己烷	720.0	30	—	—
	720.5	27	0.266	27～86
	725.8	50	0.243	50～70
	730.6	70	-	
1-甲基-顺-2-(1-反-丙烯基)环丙烷	720.1	60	-0.02	60～80
顺-2-丁烯基环丙烷	721.4	60	0.11	60～80
	723.6	80	0.07	80～100
1-甲基-顺-2-(1-顺-丙烯基)环丙烷	723.7	60	0.01	60～80
	723.9	80	0.08	80～ 00
	724.8	27	0.137	27～86
二环丙基甲烷	726.1	27	0.242	27～86
亚甲基环己烷	727.4	60		—
1,1-二甲基-2-丙基环丙烷	729.4	27	0.195	27～86
乙基环戊烷	731.0	30	—	—
	733.8	50	0.183	50～70
	737.49	70	—	—
反-1-丁烯基环丙烷	731.4	60	0.01	60～80
	731.6	80	-0.03	80～100
(2,3-亚甲基)丙基环丙烷	732.0	80	—	—
1,反-2,顺-4-三甲基环戊烷	737.7	27	0.153	27～86
	738.0	30	—	—
	741.1	50	0.169	50～70
1,反-2,顺-3-三甲基环戊烷	744.0	30	—	—
	744.5	27	0.161	27～86
	747.8	50	0.165	50～70
1,1,2-三甲基环戊烷	759.0	30	—	—
	763.2	50	0.232	50～70
	767.88	70	—	—
1,顺-2,反-4-三甲基环戊烷	773.1	50	0.218	50～70
1,顺-2,反-3-三甲基环戊烷	774.3	27	0.227	27～86
1-甲基-1-(2,3-亚甲)丙基环丙烷	778.0	80	0.19	80～100
1,顺-3-二甲基环己烷	781.0	30	—	—
1-甲基-反-2-(1-反-丙烯基)环丙烷	781.9	80	-3.995	80～100
1,1-二甲基环己烷	782.0	30	—	—
反-2,3-亚甲基-丁基环丙烷	783.7	80	0.13	80～100
1-乙基-顺-3-甲基环戊烷	783.9	27	0.202	27～86
1,顺-3-二甲基环己烷	785.0	50	0.242	50～70
1,1-二甲基环己烷	787.0	50	0.291	50～70
1-乙基-反-2-甲基环戊烷	787.0	27	0.214	27～86
1-甲基-1-乙基环戊烷	790.0	30	-	
1-甲基-顺-3-乙基环戊烷	790.3	50	0.192	50～70
(反-1,2-亚甲基)-丁基环丙烷	790.4	60	0.115	60～80
(2-甲基)-丁基环丙烷	791.0	60	—	—
(反-1,2-亚甲基)-丁基环丙烷	792.7	80	0.10	80～100
1,顺-2,顺-3-三甲基环戊烷	793.0	30		
	802.2	50	0.275	50～70
(1-甲基-2,3-亚甲基)丙基环丙烷	793.3	80	0.225	80～100
1,反-2-二甲基环己烷	801.8	50	0.287	50～70
1,顺-4-二甲基环己烷	802.0	30	—	—
	805.2	50	0.267	50～70
1,反-3-二甲基环己烷	802.0	30	—	—
	805.6	50	0.261	50～70
(顺-1,2-亚甲基)-丁基环丙烷	802.3	60	0.40	60～80
1,1,2-三甲基-2-丙基环丙烷	805.5	60	0.45	60～80
异丙基环戊烷	806.6	27	0.261	27～86
	812.1	50	0.247	50～70
(顺-1,2-亚甲基)-丁基环丙烷	810.3	80	0.14	80～100
正戊基环丙烷	812.2	60	0.06	60～80
1-乙基-顺-2-甲基环戊烷	815.6	27	0.254	27～86
	816.0	30	—	
	821.0	50	0.233	50～70
(顺-2,3-亚甲基)-丁基环丙烷	819.1	60	0.19	60～80
1,1-二甲基-2-[(2-甲基)-1-丙烯基]环丙烷	819.4	80	0.035	80～100
1,顺-2-二甲基环己烷	820.0	30	—	—
	829.3	50	0.307	50～70
1-甲基-顺-2-乙基环戊烷	821.0	50	0.233	50～70
1,1-二甲基-2-丁基环丙烷	822.6	60	—	—
(顺-2,3-亚甲基)-丁基环丙烷	822.9	80	0.12	80～100
丙基环戊烷	825.9	27	0.203	27～86
	827.0	30		—
	830.3	50	0.184	50～70
(3,4-亚甲基)丁基环丙烷	825.8	80	—	—

续表

化合物	I	柱温/℃	$\frac{\partial I}{\partial T}$	温度范围/℃
乙基环己烷	828.0	27	0.286	27～86
	829.0	30	—	
	834.3	50	0.269	50～70
1 甲基 1 (3-亚甲基)丁基环丙烷	835.4	80	0.11	80～100
1,1,3 三甲基环己烷	840.4	50	0.282	50～70
1-甲基-反-2 (4 戊基)环丙烷	848.9	80	0.075	80～100
	850.4	100	0.035	100～200
1,1 二丙基环丙烷	852.6	80	—	—
1 甲基 1-戊基环丙烷	853.1	60	—	—
顺 1,2 二丙基环丙烷	855.0	60	0.195	60～100
1 乙基-1-丁基环丙烷	855.3	80	—	—
反 1,2 二丙基环丙烷	857.0	100	—	—
1-乙基-反-2-丁基环丙烷	857.5	60	0.135	60～100
1-甲基-反-2-(反-3-戊烯基)环丙烷	860.6	80	0.065	80～100
	861.8	100	0.03	100～120
1-甲基-反-2-戊基环丙烷	864.2	60	0.0425	60～100
1 (1-乙烯基)-反-2-(反-2 丁烯基)环丙烷	866.2	80	0.05	80～100
1 (1 乙基)-反-2-丁基环丙烷	862.6	80	0.195	80～100
1 甲基-反-2-(顺-3-戊烯基)环丙烷	867.5	80	0.135	80～100
	870.2	100	0.04	100～120
1-甲基-反-2-(顺-2,4-戊二烯基)环丙烷	879.9	80	0.075	80～100
1-甲基-顺-2-(4-戊烯基)环丙烷	882.1	80	0.11	80～100
1-甲基-反-2 (反 2,4-戊二烯基)环丙烷	884.2	80	0.06	80～100
1 甲基 顺 2-(4-戊烯基)环丙烷	884.3	100	0.12	100～120
1-(1 乙烯基)-顺-2-丁基环丙烷	886.3	80	0.135	80～100
1-乙基-顺 2 丁基环丙烷	886.8	60	0.135	60～100
1-(1 乙烯基) 顺 2-(反-2-丁烯基)环丙烷	891.2	80	0.045	80～100
5-己烯基环丙烷	893.7	60	0.075	60～80
	895.2	80	0.11	80～100
	897.4	100	0.105	100～120
1-甲基-顺-2-(反 3 戊烯基)环丙烷	897.5	80	0.125	80～100
1 甲基 顺-2-戊基环丙烷	899.65	60	0.031	60～80
1 甲基-顺-2-(反-3-戊烯基)环丙烷	900.0	100	0	100～120
1-甲基-顺-2 戊基环丙烷	900.27	80	0.0915	80～100
	902.10	100	0.0705	100～120
1-甲基-反-2-(1-甲基)戊基环丙烷	909.55	60	0.0675	60～80
	910.90	80	0.1135	80～100
反-4-己烯基环丙烷	911.8	80	0.07	80～120
正己基环丙烷	912.4	60	0.015	60～80
	912.7	80	0.095	80～100
1-甲基-反-2-(1-甲基)戊基环丙烷	913.17	100	0.0695	100～120
正己基环丙烷	914.6	100	0.1	100～120
1 甲基 反 2-(1-甲基)戊基环丙烷	914.81	60	0.063	60～80
顺 己烯基环丙烷	915.4	80	0.115	80～100
1-甲基 反 2 (1-甲基)戊基环丙烷	916.07	80	0.109	80～100
顺 4 己烯基环丙烷	917.7	100	0.12	100～120
1-甲基-反-2-(1 甲基)戊基环丙烷	918.25	100	0.0585	100～120
1,1 二甲基-2-戊基环丙烷	919.6	60	0.0555	60～80
	920.71	80	0.0785	80～100
	922.28	100	0.055	100～120
顺 1-己烯基环丙烷	922.6	80	0.065	80～100
1-甲基-反-2-(2 甲基)戊基环丙烷	921.99	60	0.0495	60～80
1-甲基-反-2-(反-2,3 亚甲基 戊基)环丙烷	925.9	80		—
1 甲基 反-2-(2-甲基)戊基环丙烷	925.98	80	0.102	80～100
1-甲基-反-2 (4-甲基)戊基环丙烷	926.53	60	0.0465	60～80
	927.46	80	0.091	80～100
1-甲基-反-2 (2 甲基)戊基环丙烷	927.61	60	0.0505	60～80
	928.02	100	0.0995	100～120
	928.62	80	0.049	80～100
反-1 己烯基环丙烷	928.7	80	0.03	80～100
1 甲基 反-2-(4-甲基)戊基环丙烷	929.28	100	0.0365	100～120
顺 1 反 4 己二烯基环丙烷	929.4	80	0.035	80～100
1-甲基-反-2-(2 甲基)戊基环丙烷	929.6	100	0.0205	100～120
1 甲基-反-2-(反-3,4-亚甲基-戊基)环丙烷	931.2	80	0.12	80～100
1,2 二甲基-顺-3-戊基环丙烷	931.4	60	0.069	60～80
	932.78	80	0.1015	80～100
1-甲基-反-2-(3 甲基)戊基环丙烷	934.40	60	0.063	60～80
1,2-二甲基 顺-2-戊基环丙烷	934.81	100	0.071	100～120
1 甲基-反-2-(3-甲基)戊基环丙烷	935.66	80	0.11	80～100

续表

化合物	I	柱温/℃	$\frac{\partial I}{\partial T}$	温度范围/℃
反-1,反-4-己二烯基环丙烷	936.5	80	0.015	80～100
1,2-二甲基-反-2-戊基环丙烷	937.05	60	0.081	60～80
1-甲基-反-2-(3-甲基)戊基环丙烷	937.86	100	0.056	100～120
1,2-二甲基-反-2-戊基环丙烷	938.67	80	0.1115	80～100
1-甲基-反-2-(反-2,3-亚甲基)-4-戊烯基环丙烷	938.8	80	0.055	80～100
1-甲基-顺-2-戊基-反-3-甲基环丙烷	939.0	60	0.0215	60～80
	939.43	80	0.039	80～100
	940.21	100	0.012	100～120
1,2-二甲基-反-2-戊基环丙烷	940.90	100	0.081	100～120
1-甲基-顺-2-(1-甲基)戊基环丙烷	942.7	60	0.0865	60～80
1-甲基-反-2-戊-顺-3-甲基环丙烷	943.68	60	0.037	60～80
	944.42	80	0.0755	80～100
1-甲基-顺-2-(1-甲基)戊基环丙烷	944.43	80	0.1355	80～100
1-甲基-反-2-戊基-顺-3-甲基环丙烷	945.93	100	0.022	100～120
1-甲基-顺-2-(1-甲基)戊基环丙烷	947.14	100	0.0945	100～120
	947.3	60	0.068	60～80
	948.66	80	0.115	80～100
	950.96	100	0.079	100～120
1-甲基-1-己基环丙烷	954.29	60	0.1	60～80
1-乙基-反-2-戊基环丙烷	954.90	60	0.0595	60～80
1-甲基-反-2-(顺-2,3-亚甲基)-4-戊烯基环丙烷	955.80	80	0.11	80～100
1-乙基-反-2-戊基环丙烷	956.09	80	0.1085	80～100
1-甲基-1-己基环丙烷	956.29	80	0.0875	80～100
	958.04	100	0.0935	100～120
(顺-4,5-亚甲基己基)环丙烷	959.00	80	2.815	80～100
1-甲基-顺-2-(2-甲基)戊基环丙烷	960.80	60	0.079	60～80
1-甲基-顺-2-(4-甲基)戊基环丙烷	960.80	60	0.079	60～80
	962.38	80	0.124	80～100
1-甲基-顺-2-(2-甲基)戊基环丙烷	962.38	80	0.124	80～100
1-甲基-反-2-己基环丙烷	963.33	60	0.054	60～80
(1-甲基)己基环丙烷	964.29	60	0.125	60～80
1-甲基-反-2-己基环丙烷	964.41	80	0.0505	80～100
1-甲基-顺-2-(4-甲基)-戊基环丙烷	964.86	100	0.0855	100～120
1-甲基-顺-2-(2-甲基)-戊基环丙烷	964.86	100	0.0855	100～120
1-甲基-顺-2-(反-3,4-亚甲基-戊基)环丙烷	965.40	80	0.145	80～100
1-甲基-反-2-己基环丙烷	965.42	100	0.045	100～120
1-甲基-顺-2-(3-甲基)戊基环丙烷	966.10	60	0.0975	60～80
1-甲基-顺-2-(反-3,4-亚甲基戊基)环丙烷	966.20	80	0.135	80～100
(1-甲基)-己基环丙烷	966.79	80	0.13	80～100
1-甲基-顺-2-(3-甲基)-戊基环丙烷	968.05	80	0.1415	80～100
(1-甲基)-己基环丙烷	969.39	100	0.1285	100～120
1-甲基-顺-2-(3-甲基)戊基环丙烷	970.88	100	0.0935	100～120
(2-甲基)-己基环丙烷	972.14	60	0.102	60～80
(3-甲基)-己基环丙烷	973.15	60	0.104	60～80
(2-甲基)-己基环丙烷	974.18	80	0.105	80～100
(3-甲基)-己基环丙烷	975.23	80	0.106	80～100
(5-甲基)己基环丙烷	975.50	60	0.096	60～80
(2-甲基)-己基环丙烷	976.28	100	0.134	100～120
(3-甲基)己基环丙烷	977.35	100	0.0805	100～120
(5-甲基)-己基环丙烷	977.42	80	0.102	80～100
	979.46	100	0.0985	100～120
(4-甲基)-己基环丙烷	980.53	60	0.1105	60～80
(反-4,5-亚甲基己基)环丙烷	981.20	100	0.11	100～120
(4-甲基)-己基环丙烷	982.74	80	0.1185	80～100
1-乙基-顺-2-戊基环丙烷	985.10	60	0.066	60～80
(4-甲基)-己基环丙烷	985.11	100	0.116	100～120
1-乙基-顺-戊基环己烷	986.42	80	0.1075	80～100
(反-1,2-亚甲基己基)环丙烷	987.10	80	0.145	80～100
(反-1,2-亚甲基)-反-4-己烯基环丙烷	987.50	80	0.10	80～100
1-乙基-顺-2-戊基环丙烷	988.57	100	0.0705	100～120
(反-4,5-亚甲基)-顺-1-己烯基环丙烷	995.50	80	0.09	80～100
(反-4,5-亚甲基)-反-1-己烯基环丙烷	996.00	80	0.065	80～100
1-甲基-顺-2-己基环丙烷	997.60	60	0.07	60～80
(反-1,2-亚甲基己基)环丙烷	998.50	80	0.18	80～100
1-甲基-顺-2-己基环丙烷	999.00	80	0.10	80～100
	1001.00	100	0.07	100～120
1-甲基-顺-2-戊基-顺-3-甲基环丙烷	1001.30	60	0.115	60～80

续表

化合物	I	柱温/℃	$\frac{\partial I}{\partial T}$	温度范围/℃
1-甲基-顺-2-(顺-3,4-亚甲基-戊基)环丙烷	1003.50	80	—	—
1-甲基-顺-2-戊基-顺-3-甲基环丙烷	1003.60	80	0.14	80~100
1-甲基-顺-2-(顺-3,4-亚甲基-戊基)环丙烷	1003.80	80	-	—
(顺-1,2-亚甲基)-反-4-己烯基环丙烷	1005.30	80	0.155	80~100
1-甲基-顺-2-戊基-顺-3-甲基环丙烷	1008.70	100	0.115	100~120
正庚基环丙烷	1011.90	60	0.0815	60~80
	1013.53	80	0.087	80~100
	1015.27	100	0.0835	100~120
(顺-4,5-亚甲基-己基)环丙烷	1015.30	100	0.175	100~120
1-(2-丙烯基)-反-2-(4-戊烯基)环丙烷	1022.20	100	0.145	100~120
(5,6-亚甲基-己基)环丙烷	1026.70	80	0.175	80~100
	1030.20	100	0.155	100~120
1-(2-丙烯基)-反-2-戊基环丙烷	1038.00	100	0.085	100~120
1-乙基-反-2-己基环丙烷	1056.60	100	0.065	100~120
反-4,7-辛二烯环丙烷	1083.30	100	0.13	100~120
1-乙基-顺-2-己基环丙烷	1087.20	100	0.08	100~120
反-2-辛烯基环丙烷	1098.50	100	0.135	100~120
反-3-辛烯基环丙烷	1099.60	100	0.08	100~120
正辛基环丙烷	1115.70	100	—	
(反-2,3-亚甲基)-7-辛烯基环丙烷	1156.90	100	—	
(反-4,5-亚甲基)-7-辛烯基环丙烷	1132.00	100	—	—
(反-2,3-亚甲基)-辛基环丙烷	1166.80	100	0.165	100~120
(反-4,5-亚甲基)辛基环丙烷	1168.10	100	0.155	100~120
1-戊基-2-甲基-反-2-戊基环丙烷	1194.40	100		-
7-辛烯基环丙烷	1197.00	80	—	—
1-丙基-2-甲基-反-2-己基环丙烷	1198.60	100	—	—
1-己基-2-甲基-反-2-丙基环丙烷	1204.40	100	—	—
1-戊基-2-甲基-顺-2-丁基环丙烷	1206.50	100	—	—
1-乙基-2-甲基-反-2-庚基环丙烷	1208.20	100		—
1-丙基-2-甲基-顺-2-己基环丙烷	1211.60	100	—	—
1-己基-2-甲基-顺-2-丙基环丙烷	1214.40	100	—	—
正壬基环丙烷	1215.50	120	—	
1-乙基-2-甲基-顺-2-庚基环丙烷	1218.60	100	—	—
(7,8-亚甲基)辛基环丙烷	1231.20	100	—	
(反-2,3-亚甲基)壬基环丙烷	1264.80	100	—	
正癸基环丙烷	1315.40	120	—	—

表 13-161　C_5～C_8 烃保留指数 (一)[3]

固定液：角鲨烷

化合物 \ I \ 柱温/℃	22	30	40	55	60	70	80	100
2-甲基丁烷	474	474	475	473	475	474	476	477
2-甲基戊烷	569	569	570	570	570	569	570	571
2-甲基己烷	666	666	666	667	667	668	667	668
2-甲基庚烷	765	764	765	765	765	766	765	765
3-甲基戊烷	583	583	584	585	584	586	585	586
3-甲基己烷	675	676	676	677	676	677	677	678
3-甲基庚烷	769	—	772	773	772	773	773	774
3-甲基辛烷	—	—		—	—	—	870	871
2,2-二甲基丁烷	534	535	536	538	537	539	539	541
2,2-二甲基戊烷	—	625	625	626	—	626		—
2,2-二甲基己烷	718		719	720	·	721	—	
2,3-二甲基丁烷	565	566	567	569	568	569	569	571
2,3-二甲基戊烷		670	671	672	671	673	672	673
2,3-二甲基己烷	758	—	759	761	—	761	—	—
2,4-二甲基戊烷	629	629	632	631	630	630	630	631
2,4-二甲基己烷	731	—	732	733	—	734	—	—

续表

化合物 \ I \ 柱温/℃	22	30	40	55	60	70	80	100
3,3-二甲基戊烷	—	656	657	660		661	—	—
3,3-二甲基己烷	—	—	742	744	—	746	—	—
3-乙基戊烷	684	685	685	687	686	687	688	689
3-乙基己烷	771	—	772	773	—	774	—	—
2,2,3-三甲基丁烷	636	637	638	641	—	642	—	
2,2,3-三甲基戊烷	—		736	739	—	741	—	
4-甲基庚烷	—	—	767	768	768	768	768	769
2,5-二甲基己烷	—		728	729	729	730	729	730
3,4-二甲基己烷	—	—	770	771	—	773	—	—
2-甲基-3-乙基戊烷	758		750	762	—	764	—	—
3-甲基-3-乙基戊烷	—	—	772	775	—	778	—	—
2,2,4-三甲基戊烷	687	689	689	392	691	693	694	696
2,3,3-三甲基戊烷	—	—	757	761	—	764		—
2,3,4-三甲基戊烷	—	—	751	754	—	756	—	—
2,2,5-三甲基己烷	775	—	—	—	777	—	778	779
2,2,3,3-四甲基丁烷	—	—	723	728	—	731	—	—
苯	631	632	634	643	—	645	—	
甲苯	738	739	742	750	—	752	—	—
环戊烷	562	563	564	568	—	570		—
甲基环戊烷	623	624	626	630	—	631	—	—
环己烷	656	658	660	664	—	667	—	—
甲基环己烷	719	721	723	727		731	—	—

表 13-162 $C_5 \sim C_8$ 烃保留指数（二）[24]

固定液：OV-101

化合物 \ I \ 柱温/℃	50	60
正戊烷	500.00	500.00
2,2-二甲基丁烷	537.12	537.68
2,3-二甲基丁烷	566.44	—
环戊烷	566.18	567.71
2-甲基戊烷	569.62	569.68
1-己烯	588.86	588.88
3-甲基戊烷	583.80	584.36
正己烷	600.00	600.00
2,4-二甲基戊烷	630.61	630.73
苯	652.07	653.83
环己烷	661.50	663.59
2,3-二甲基戊烷	669.92	670.76
3-甲基己烷	676.24	676.63
1-庚烯	388.71	688.70
正庚烷	700.00	700.00
2,2-二甲基己烷	722.35	
2,2,3-三甲基戊烷	734.27	735.83
2,4-二甲基己烷	731.33	734.73
3,3-二甲基己烷	741.71	742.60
2,3,4-三甲基戊烷	750.12	751.73
甲苯	754.87	755.95
2,3,3-三甲基戊烷	754.61	756.52
2,3-二甲基己烷	760.93	761.32
2-甲基庚烷	763.39	766.37
3-甲基庚烷	773.46	774.07
2,2,5-三甲基己烷	784.49	784.99
辛烯	788.24	788.19
正辛烷	800.00	800.00

表 13-163　C_5～C_8 烃保留指数（三）[29]

柱温：60℃

化合物 \ I \ 固定液	正十八烷	1-氯十八烷	十八烷-1-醇	化合物 \ I \ 固定液	正十八烷	1-氯十八烷	十八烷-1-醇
2,2-二甲基丁烷	538.01	521.03	521.21	3-甲基己烷	675.44		—
环戊烷	561.20	547.21	549.50	2,2-二甲基己烷	719.16	716.03	718.75
3-甲基戊烷	583.32	576.26	575.60	2,5-二甲基己烷	728.28	724.83	725.48
2,4-二甲基戊烷	629.85	621.90	625.75	2,4-二甲基己烷	735.73	734.93	738.34
苯	636.30	697.28	676.43	2,3,4-三甲基戊烷	750.77	749.96	753.32
环己烷	656.25		—	2-甲基庚烷	764.82	763.21	764.17
2,3-二甲基戊烷	670.26	667.60	668.98	2,2,5-三甲基己烷	776.29	770.60	771.55

表 13-164　C_5～C_8 烃保留指数（四）[62]

柱温：60℃

化合物 \ I \ 固定液	正十八烷	1-十八烷基氯	1-十八醇	化合物 \ I \ 固定液	正十八烷	1-十八烷基氯	1-十八醇
戊烷	500	500	500	3-甲基己烷	675	—	—
2,2-二甲基丁烷	538	521	521	正庚烷	700	700	700
环戊烷	561	547	549	2,2-二甲基己烷	719	716	718
3-甲基戊烷	583	576	575	2,5-二甲基己烷	728	724	725
正己烷	600	600	600	2,2,3-三甲基戊烷	735	734	738
2,4-二甲基戊烷	629	624	625	2,3,4-三甲基戊烷	750	749	753
苯	636	697	676	2-甲基庚烷	764	763	764
环己烷	656	—		2,2,5-三甲基己烷	776	770	771
2,3-二甲基戊烷	670	667	668	正辛烷	800	800	800

表 13-165　C_5～C_8 烃保留指数（五）[22]

柱温：30℃

化合物 \ I \ 固定液	角鲨烷	二丁基马来酸酯	二丙烯二醇	化合物 \ I \ 固定液	角鲨烷	二丁基马来酸酯	二丙烯二醇
2-甲基丁烷	474	475	—	2,3,4-三甲基戊烷	—	753	757
2-甲基戊烷	567	570	567	环戊烷	562	578	604
2-甲基己烷	666	667	666	甲基环戊烷	625	636	658
2-甲基庚烷	765	766	762	乙基环戊烷	731	741	765
3-甲基戊烷	583	585	585	正丙基环戊烷	827	836	857
3-甲基己烷	676	676	677	异丙基环戊烷	—	816	838
3-甲基庚烷	772	774	773	1,1-二甲基环戊烷	670	681	696
3-乙基戊烷	685	687	692	1,顺-2-二甲基环戊烷	716	726	751
4-甲基庚烷	757	769	757	1,反-2-二甲基环戊烷	686	695	711
2,2-二甲基丙烷	410	404	—	1,顺-3-二甲基环戊烷	680	687	702
2,2-二甲基丁烷	535	537	532	1,反-3-二甲基环戊烷	684	691	707
2,2-二甲基戊烷	625	625	618	1-甲基-1-乙基环戊烷	790	802	821
2,2-二甲基己烷	719	720	-	1-甲基-顺-2-乙基环戊烷	816	826	850
2,3-二甲基丁烷	561	568	567	1,1,2-三甲基环戊烷	759	770	786
2,3-二甲基戊烷	670	763	676	1,1,3-三甲基环戊烷	720	729	
2,3-二甲基己烷	759	762	762	1,顺-2,顺-3-三甲基环戊烷	793	806	825
2,4-二甲基戊烷	630	629	627	1,反-2,顺-3-三甲基环戊烷	744	751	
2,4-二甲基己烷	730	733	728	1,反-2,顺-4-三甲基环戊烷	738	712	760
2,5-二甲基己烷	728	729	723	环己烷	659	671	702
3,3-二甲基戊烷	657	659	—	甲基环己烷	720	730	753
3,3-二甲基己烷	712	743	—	乙基环己烷	829	840	862
3,4-二甲基己烷	769	770		1,1-二甲基环己烷	782	789	815
2,2,3-三甲基丁烷	638	636	—	1,顺-2-二甲基环己烷	820	833	861
2,2,3-三甲基戊烷		738	739	1,顺-3-二甲基环己烷	781	786	802
2,2,4-三甲基戊烷	689	687	—	1,反-3-二甲基环己烷	802	811	833
2,3,3-三甲基戊烷	756	759	762	1,顺-4-二甲基环己烷	802	810	831

表 13-166 C_5～C_8 烃保留指数（六）[10]

固定液：OV-101

柱温/℃ 保留指数 化合物	40	45	50	55	60	65	70	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
	I							
正戊烷	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	0.00
2,2-二甲基丁烷	536.3	536.4	536.5	536.9	537.0	537.4	538.0	0.70
环戊烷	565.6	565.7	566.6	566.8	569.3	569.8	570.1	1.50
2,3-二甲基丁烷	565.6	565.7	566.6	566.8	569.3	569.8	570.3	1.57
2-甲基戊烷	569.5	569.5	569.6	569.6	569.7	569.8	569.9	0.13
正己烷	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	—
2,2-二甲基戊烷	624.4	624.7	624.9	625.2	625.5	626.0	626.2	0.60
甲基环戊烷	626.9	627.7	628.3	629.2	630.1	631.3	631.6	1.57
2,4-二甲基戊烷	630.2	630.4	630.4	630.8	631.0	631.3	631.6	0.47
2,2,2-三甲基丁烷	635.7	636.5	637.2	638.0	638.5	639.8	639.9	1.40
苯	652.1	653.1	653.9	655.2	655.9	657.5	660.5	2.80
3,3-二甲基戊烷	655.1	655.8	656.3	657.1	657.8	658.5	659.5	1.80
环己烷	658.9	659.9	661.1	662.3	663.4	664.7	665.5	2.20
2-甲基己烷	667.2	667.3	667.4	667.5	667.6	667.7	667.7	0.17
2,3-二甲基戊烷	669.0	669.3	669.7	670.3	670.7	671.2	671.5	0.83
1,1-二甲基环戊烷	671.8	672.7	673.6	674.5	676.5	676.8	676.9	1.70
3-甲基己烷	675.8	675.9	676.2	676.4	676.6	676.8	676.9	0.37
1-*Z*,3-二甲基环戊烷	682.0	682.8	683.6	684.4	685.3	686.1	686.9	1.63
1-*E*,3-二甲基环戊烷	684.7	685.4	686.3	687.1	867.9	688.9	689.9	1.73
1-*E*,2-二甲基环戊烷	687.4	688.0	689.0	689.9	690.5	691.3	692.4	1.67
正庚烷	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	0.00
1-*Z*,2-二甲基环戊烷	719.6	720.2	721.0	721.7	723.0	723.2	724.5	1.63
甲基环己烷	719.6	720.4	721.4	722.6	723.9	725.1	726.4	2.27
1,1,3-三甲基环戊烷	721.9	722.7	723.8	724.6	725.6	726.5	727.5	1.87
2,2-二甲基己烷	721.9	722.0	723.0	723.5	723.8	725.1	725.5	1.20
乙基环戊烷	729.9	730.8	732.0	732.9	734.1	734.7	735.7	1.93
2,5-二甲基己烷	731.7	731.8	732.0	732.1	732.1	732.4	732.4	0.23
2,4-二甲基己烷	733.5	733.7	734.1	734.4	734.6	734.7	735.4	0.63
1-*E*,2-*Z*,4-三甲基环戊烷	738.6	739.3	740.3	741.1	741.8	—	743.5	1.63
3,3-二甲基己烷	740.1	740.6	741.4	741.5	741.8	—	742.6	0.83
1-*E*,2-*Z*,3-三甲基环戊烷	745.2	746.3	747.3	748.2	749.0	—	751.0	1.93
2,3,4-三甲基戊烷	748.4	749.0	750.0	750.6	751.3	—	752.8	1.47
甲苯	753.8	754.8	756.0	757.1	758.1	—	760.3	2.17
2,3-二甲基己烷	759.4	760.0	760.3	760.7	761.0	—	761.8	0.80
1,1,2-三甲基环戊烷	759.4	760.0	761.6	762.8	763.9	—	766.3	2.30
2-甲基-3-乙基戊烷	760.5	761.0	761.6	762.8	762.9	—	764.4	1.30
1,1,3,3-四甲基环戊烷	762.3	763.3	—	—	—	—	—	—
2-甲基庚烷	766.0	766.1	766.2	766.3	766.3	—	766.5	0.17
4-甲基庚烷	767.3	767.4	767.6	767.6	767.8	—	768.0	0.70
3,4-二甲基己烷	768.4	768.8	769.4	769.8	770.2	·	771.2	0.93
1-*Z*,2-*E*,4-三甲基环戊烷	769.9	771.1	772.2	773.7	774.8	—	777.3	2.47
2,2,4,4-四甲基戊烷	769.9	771.1	772.2	773.7	774.8	—	777.3	2.47
1-*Z*,3-二甲基环己烷	773.4	774.4	775.7	776.9	778.0	—	780.4	2.33
3-甲基庚烷	775.3	773.4	773.5	773.7	773.8	—	774.1	0.80
3-乙基己烷	774.1	774.4	774.6	774.8	775.1	—	775.6	1.40
1-*E*,4-二甲基环己烷	775.0	776.1	777.4	778.6	779.7	-	782.1	2.37
正辛烷	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	0.00

表 13-167 $C_5 \sim C_8$ 烃保留指数（七）[50]

固定液：OV-1　　柱温：50℃

化合物	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	温度范围/℃	化合物	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	温度范围/℃
反-2-戊烯	506.8	−0.0450	30～70	2,2-二甲基戊烷	624.7	0.05	30～50
顺-2-戊烯	515.1	−0.0060	30～90	甲基环戊烷	628.5	0.182	30～90
2-甲基-2-丁烯	519.9	0.0026	30～70	2,4-二甲基戊烷	630.2	0.025	30～50
3-甲基-1-戊烯	558.0	0.05	30～50	苯	652.3	0.212	30～90
环戊烷	566.2	0.182	30～70	环己烷	661.2	0.252	30～90
2,3-二甲基丁烷	566.0	0.045	30～50	2-甲基己烷	667.3	0.0255	30～90
2-甲基戊烷	569.2	0.0299	30～90	2,3-二甲基戊烷	669.8	0.0899	30～70
3-甲基戊烷	583.6	0.0510	30～90	3-甲基己烷	676.0	0.0475	30～90
2-甲基-1-戊烯	588.0	0.0350	30～70	1-顺-3-二甲基环戊烷	683.6	0.13	30～50
反-2-己烯	604.2	−0.01	30～50	1-反-3-二甲基环戊烷	686.3	0.15	30～50
2-甲基-2-戊烯	606.4	−0.015	30～50	顺-2-庚烯	712.2	0.0398	50～70
3-甲基-顺-2-戊烯	610.4	0.04	30～50	甲苯	754.4	0.2299	50～90
顺-2-己烯	613.8	0.025	30～70	2-甲基庚烷	765.5	0.0124	50～90
3-甲基-反-2-戊烯	619.7	0.0124	30～70	3-甲基庚烷	772.9	0.0349	50～90

表 13-168 $C_5 \sim C_8$ 烃保留指数（八）[127]

固定液：$C_{78}H_{158}+C_{77}H_{157}OH$　　柱温：130℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
2,2-二甲基丁烷	541.3	1-己烯	588.1	环戊烷	588.2
2,2-二甲基戊烷	628.3	1-庚烯	686.5	环己烷	694.0
2,4-二甲基戊烷	629.5	1-辛烯	785.6	环庚烷	837.2
2,2,3-三甲基丁烷	652.1	1-壬烯	885.5	环辛烷	965.2
2,2-二甲基己烷	719.4	1-癸烯	985.2	苯	677.6
2,4-二甲基己烷	733.1	1-己炔	589.7	甲苯	785.8
3,4-二甲基己烷	780.3	1-庚炔	689.1	乙基苯	875.4
2,3,4-三甲基戊烷	764.8	1-辛炔	788.7	丙基苯	963.9
2,2,4-三甲基戊烷	694.5	1-壬炔	889.0		
2,2,4,6,6-五甲基庚烷	989.7	1-癸炔	988.9		

表 13-169 $C_5 \sim C_9$ 烃保留指数（一）[13]

固定液：角鲨烷

柱温/℃	50	70	$\frac{\partial I}{\partial T}$	柱温/℃	50	70	$\frac{\partial I}{\partial T}$
化合物＼保留指数	I			化合物＼保留指数	I		
正丁烷	400.00	400.00	-	3-甲基戊烷	584.24	585.14	0.045
2,2-二甲基丙烷	412.30	412.91	0.030	正己烷	600.00	600.00	—
2-甲基丁烷	475.32	475.47	0.007	1,1,2,2-四甲基环丙烷	619.85	621.75	0.095
1-反-2-二甲基环丙烷	479.20	479.76	0.028	乙基环丁烷	620.99	623.43	0.122
正戊烷	500.00	500.00	-	2,2-二甲基戊烷	625.64	626.95	0.065
乙基环丙烷	510.20	511.53	0.066	甲基环戊烷	627.90	630.96	0.153
1-顺-2-二甲基环丙烷	515.01	516.15	0.057	2,2,3-三甲基丁烷	639.70	642.59	0.144
2,2-二甲基丁烷	536.81	538.45	0.082	3,3-二甲基戊烷	658.85	661.50	0.132
1,1,2-三甲基环丙烷	549.24	550.33	0.054	环己烷	662.73	667.10	0.218
环戊烷	565.74	568.49	0.137	2-甲基己烷	666.62	666.96	0.017
2-甲基戊烷	569.66	570.01	0.017	1-顺-3-二甲基环戊烷	682.65	685.92	0.163

续表

柱温/℃	50	70	$\frac{\partial I}{\partial T}$	柱温/℃	50	70	$\frac{\partial I}{\partial T}$
保留指数 / 化合物	I			保留指数 / 化合物	I		
1-反-3-二甲基环戊烷	686.78	690.10	0.166	1-顺-3-二甲基环己烷	785.04	789.89	0.242
1-反-2-二甲基环戊烷	689.20	692.38	0.159	1,1-二甲基环己烷	786.97	792.80	0.291
正庚烷	700.00	700.00	—	正辛烷	800.00	800.00	—
2,2-二甲基己烷	719.41	720.47	0.051	1-反-2-二甲基环己烷	801.80	807.54	0.287
1,1,3-三甲基环戊烷	723.64	727.47	0.191	1-顺-2-顺-3-三甲基环戊烷	802.20	807.75	0.277
甲基环己烷	725.78	730.63	0.242	1-反-3-二甲基环己烷	805.61	810.81	0.261
乙基环己烷	733.83	737.49	0.183	2,2,3-三甲基己烷	821.56	824.33	0.138
2,2,3-三甲基戊烷	737.15	740.11	0.148	1-顺-2-二甲基环己烷	829.27	835.41	0.307
1-反-2-顺-3-三甲基环戊烷	747.81	751.11	0.165	乙基环己烷	834.28	839.66	0.269
1,1,2-三甲基环戊烷	763.24	767.88	0.232	1,1,3-三甲基环己烷	840.39	846.03	0.282
2-甲基庚烷	764.86	765.16	0.015	2,2,3,3-四甲基戊烷	852.11	857.61	0.257
3-甲基庚烷	772.29	772.92	0.031	正壬烷	900.00	900.00	—
1-顺-2-反-4-三甲基环戊烷	773.06	777.12	0.218				

表 13-170　$C_5 \sim C_9$ 烃保留指数（二）[67]

固定液：SE-30　　柱温：80℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
1,4-戊二烯	480	环己烯	685	乙烯基环己烷	824
1-戊烯	492	2,4-二甲基-1,3-戊二烯	696	二甲基环己烯	829
异戊间二烯	507	1,4-环己二烯	706	4-己烯基-1-环己烯	833
1,3-环戊二烯	540	乙烯基环戊烷	727	乙基苯	854
环戊烯	561	甲基环己烷	735	2,5-二甲基-2,4-己二烯	861
1,5-己二烯	577	乙基环戊烷	740	亚乙基环己烷	869
2-甲基-1-戊烯	590	甲基-1-环己烯	743	1-乙基环己烯	872
1,4-己二烯	596	1-乙基环戊烯	756	苯乙烯	879
2-甲基-2-戊烯	607	甲苯	762	邻二甲苯	884
1,3-己二烯	619	1-甲基环己烯	771	1-壬烯	888
2-甲基-1,3-环戊二烯	640	1,7-辛二烯	779	壬烯	891
1-甲基环戊烯	651	1-辛烯	789	1-乙基-1,4-环己二烯	901
苯	659	辛烯	793		
1,3-环己二烯	671	二甲基环己烯	816		

表 13-171　$C_5 \sim C_9$ 烃保留指数（三）[63]

固定液：角鲨烷

柱温/℃	25	55	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	柱温/℃	25	55	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
保留指数 / 化合物	I			保留指数 / 化合物	I		
正丁烷	400.0	400.0	0.00	2,4-二甲基戊烷	629.0	626.1	0.34
2-甲基丁烷	473.0		0.07	苯	635.3	641.2	2.47
正戊烷	500.0	500.0	0.00	2,2,3-三甲基丁烷	636.3	—	1.44
2,2-二甲基丁烷	534.6	--	0.82	3,3-二甲基戊烷	655.4	660.6	1.32
环戊烷	562.0	569.9	1.38	环己烷	657.6	662.3	2.22
2,3-二甲基丁烷	564.6	569.9	0.90	2-甲基己烷	665.4	664.8	0.17
2-甲基戊烷	568.3	569.9	0.17	1,1-二甲基环戊烷	669.1	675.6	1.96
3-甲基戊烷	582.6	585.0	0.45	2,3-二甲基戊烷	669.1	672.6	0.86
正己烷	600.0	600.0	0.00	3-甲基己烷	674.8	675.6	0.3[illegible]
2,2-二甲基戊烷	624.7	626.1	0.65	1,顺-3-二甲基环戊烷	678.9	683.5	1.63
甲基环戊烷	624.7	626.1	1.52	1,反-3-二甲基环戊烷	682.9	686.8	1.63

续表

柱温/°C 保留指数 化合物	25	55	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
	I		
3-乙基戊烷	685.3	686.8	0.61
1,反-2-二甲基环戊烷	685.3	689.5	1.59
2,2,4-三甲基戊烷	—	—	1.08
正庚烷	700.0	700.0	0.00
1,顺-2-二甲基环戊烷	716.4	722.8	2.10
2,2-二甲基己烷	721.3	720.4	0.52
1,1,3-三甲基环戊烷	721.3	724.7	1.91
2,2,3,3-四甲基丁烷	721.3	726.6	2.39
甲基环己烷	721.3	726.6	2.43
2,5-二甲基己烷	727.0	726.6	0.22
乙基环戊烷	730.0	735.5	1.83
2,4-二甲基己烷	730.0	732.9	0.42
2,2,3-三甲基戊烷	—	737.6	1.52
1,反-2,顺-4-三甲基环戊烷	737.0	742.5	1.63
3,3-二甲基己烷	740.5	743.7	1.32
甲苯	710.5	747.6	2.42
1,反-2,顺-3-三甲基环戊烷	744.1	749.1	1.65
2,3,4-三甲基戊烷	748.8	—	1.27
2,3,3-三甲基戊烷	754.9	759.9	2.02
1,1,2-三甲基环戊烷	758.1	764.5	2.32
2-甲基-3-乙基戊烷	758.1	—	1.00
2,3-二甲基己烷	758.1	759.9	0.58
2-甲基庚烷	764.2	764.5	0.15
4-甲基庚烷	765.0	766.8	0.15
3,4-二甲基己烷	768.1	—	1.00
1,顺-2,反-4-三甲基环戊烷	768.1	772.1	2.18
3-甲基-3-乙基戊烷	768.1	—	1.95
2,2,4,4-四甲基戊烷	768.1	—	1.90
3-乙基己烷	771.0	772.1	0.68
3-甲基庚烷	771.0	772.1	0.31
1,顺-2,反-3-三甲基环戊烷	774.1	779.8	2.27
2,2,5-三甲基己烷	774.1	776.6	0.65
1,顺-3-二甲基环己烷	779.9	786.4	2.12
1,反-4-二甲基环己烷	779.9	788.3	2.77
1,1-二甲基环己烷	779.9	786.4	2.91
1-甲基-顺-3-乙基环戊烷	783.2	788.3	1.93
环庚烷	786.3	794.7	3.54
1-甲基-反-3-乙基环戊烷	786.3	791.6	2.02
2,2,4-三甲基己烷	786.3	—	1.35
1-甲基-反-2-乙基环戊烷	786.3	791.6	2.14
1-甲基-1-乙基环戊烷	788.4	794.7	—
1,反-2-二甲基环己烷	795.5	803.3	2.37
1,顺-2,顺-3-三甲基环戊烷	795.5	803.3	2.77
1,顺-4-二甲基环己烷	800.0	806.5	2.95
1,反-3-二甲基环己烷	800.0	806.5	2.61
正辛烷	800.0	800.0	0.00
异丙基环戊烷	806.8	—	2.61
2,2-二甲基庚烷	813.7	—	0.43
1-甲基-顺-3-乙基环戊烷	815.8	—	2.54
2,2,3-三甲基己烷	819.0	—	1.38
2,4-二甲基庚烷	—	—	0.20
1,顺-2-二甲基环己烷	822.6	829.3	3.07
2-甲基-4-乙基己烷	822.6	—	0.55
正丙基环戊烷	825.6	830.1	2.03
2,6-二甲基庚烷	825.6	—	0.25
乙基环己烷	829.3	834.6	2.69
乙基苯	829.3	834.6	2.80
2,5-二甲基庚烷	832.0	—	0.30
3,5-二甲基庚烷	832.0		0.55
3,3-二甲基庚烷	—	—	1.15
1,1,3-三甲基环己烷	834.7	840.3	2.82
2,3,3-三甲基己烷	835.5	841.3	1.85
1,1,4-三甲基环己烷	837.2	843.8	—
1,顺-3,顺-5-三甲基环己烷	840.4	847.0	—
对二甲苯	843.9	849.5	2.68
2,3,4-三甲基己烷	843.9	—	1.60
间二甲苯	846.3	852.4	2.64
2,3-二甲基庚烷	—	853.5	0.65
4-乙基庚烷	—	856.7	0.45
1,顺-2,顺-3,反-4-四甲基环戊烷	—	859.5	—
3,4-二甲基庚烷	—	860.2	1.05
4-甲基辛烷	—	861.5	0.30
2-甲基辛烷	—	863.3	0.15
3-乙基庚烷	—	865.7	0.45
3-甲基辛烷		869.3	0.35
1-甲基-反-3-异丙基环戊烷	—	869.3	—
1-甲基-顺-3-异丙基环戊烷	—	869.3	—
邻二甲苯	—	870.9	3.10
1,反-3-二甲基-顺-2-乙基环戊烷	—	877.0	—
3,3-二乙基戊烷	—	880.6	2.90
1-甲基-1-丙基环戊烷	—	882.3	—
1-甲基-反-2-丙基环戊烷	—	882.3	—
1-甲基-顺-3-丙基环戊烷	—	883.7	—
1-甲基-反-3-丙基环戊烷	—	885.1	—
1,顺-2,顺-4-三甲基环己烷	—	886.5	—
1,顺-2,反-4-三甲基环己烷	—	889.6	—
1,反-2-二乙基环戊烷	—	891.7	—
异丁基环戊烷	—	891.7	—
1-甲基-1-乙基-环己烷		894.3	—
1,顺-3-二乙基环戊烷	—	894.3	—
1,反-3-二乙基环戊烷	—	894.3	—
异丙基苯	888.6	895.2	2.50
正壬烷	900.0	900.0	0.00

表 13-172 C_5～C_9 烃保留指数（四）[79]

柱温：50℃

固定液	角鲨烷		OV-101	
化合物 \ 保留指数	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
正戊烷	500.0	0.00	500.0	0.00
2-甲基丁烷	475.3	0.30	478.8	0.29
2,2-二甲基丙烷	412.2	0.52	413.4	0.49
正己烷	600.0	0.00	600.0	0.00
2-甲基戊烷	569.6	0.13	565.9	0.13
3-甲基戊烷	584.3	0.50	584.4	0.48
2,2-二甲基丁烷	536.8	0.83	537.0	0.79
2,3-二甲基丁烷	567.6	1.03	566.7	0.98
正庚烷	700.0	0.00	700.0	0.00
2-甲基己烷	666.7	0.15	667.6	0.14
3-甲基己烷	676.3	0.27	676.3	0.26
3-乙基戊烷	686.2	0.65	686.7	0.62
2,2-二甲基戊烷	625.8	0.70	625.0	0.67
2,3-二甲基戊烷	671.8	0.95	670.2	0.90
2,4-二甲基戊烷	629.8	0.35	629.1	0.33
3,3-二甲基戊烷	659.0	1.38	656.6	1.31
2,2,3-三甲基丁烷	640.0	1.40	637.7	1.33
正辛烷	800.0	0.00	800.0	0.00
2-甲基庚烷	764.9	0.28	766.1	0.26
3-甲基庚烷	772.5	0.27	773.5	0.26
4-甲基庚烷	767.2	0.25	767.5	0.23
3-乙基己烷	772.7	0.55	774.6	0.52
2,2-二甲基己烷	719.6	0.55	722.1	0.52
2,3-二甲基己烷	760.4	0.65	760.3	0.62
2,4-二甲基己烷	732.1	0.65	732.4	0.62
2,5-二甲基己烷	728.5	0.38	731.5	0.36
3,3-二甲基己烷	743.8	1.35	741.0	1.28
3,4-二甲基己烷	770.9	1.07	769.4	1.01
2-甲基-3-乙基戊烷	761.6	1.38	761.9	1.31
3-甲基-3-乙基戊烷	774.4	2.05	774.6	1.95
2,2,3-三甲基戊烷	737.3	1.63	734.1	1.55
2,2,4-三甲基戊烷	690.2	1.13	689.3	1.07
2,3,3-三甲基戊烷	759.8	2.20	754.5	2.09
2,3,4-三甲基戊烷	752.6	1.50	750.1	1.43
2,2,3,3-四甲基丁烷	726.1	2.45	724.0	2.33
正壬烷	900.0	0.00	900.0	0.00
2-甲基辛烷	864.7	0.15	865.1	0.14
3-甲基辛烷	870.3	0.35	871.6	0.34
4-甲基辛烷	863.0	0.30	864.1	0.28
3-乙基庚烷	866.9	0.45	868.6	0.43
4-乙基庚烷	857.5	0.45	859.0	0.43
2,2-二甲基庚烷	815.8	0.45	817.9	0.43
2,3-二甲基庚烷	854.8	0.65	853.7	0.62
2,4-二甲基庚烷	821.5	0.08	823.3	0.08
2,5-二甲基庚烷	832.9	0.30	833.5	0.29
2,6-二甲基庚烷	827.2	0.25	828.5	0.24
3,3-二甲基庚烷	836.1	1.15	835.7	1.09
3,4-二甲基庚烷	858.1	0.88	857.4	0.83
3,5-二甲基庚烷	833.7	0.55	833.5	0.52
4,4-二甲基庚烷	827.6	1.15	828.5	1.09
2-甲基-3-乙基己烷	843.7	1.05	845.5	1.00
2-甲基-4-乙基己烷	824.3	0.55	826.4	0.52
3-甲基-3-乙基己烷	853.5	1.75	853.7	1.66
3-甲基-4-乙基己烷	854.8	1.55	854.8	1.47
2,2,3-三甲基己烷	821.8	1.50	819.2	1.42
2,2,4-三甲基己烷	789.5	1.35	789.8	1.28
2,2,5-三甲基己烷	776.7	0.65	777.7	0.62
2,3,3-三甲基己烷	840.0	1.85	838.7	1.76
2,3,4-三甲基己烷	849.1	2.15	845.5	2.04
2,3,5-三甲基己烷	812.4	0.85	811.8	0.81
2,4,4-三甲基己烷	808.2	1.60	807.9	1.52
3,3,4-三甲基己烷	853.1	2.15	850.0	2.04
3,3-二乙基戊烷	877.6	2.90	878.9	2.77
2,2-二甲基-3-乙基戊烷	822.2	2.10	823.3	1.99
2,3-二甲基-3-乙基戊烷	872.3	2.70	871.6	2.58
2,4-二甲基-3-乙基戊烷	836.1	1.80	835.7	1.71
2,2,3,3-四甲基戊烷	852.4	2.65	848.1	2.52
2,2,3,4-四甲基戊烷	820.1	2.25	817.9	2.41
2,2,4,4-四甲基戊烷	773.1	1.90	773.5	1.81
2,3,3,4-四甲基戊烷	858.9	2.65	853.7	2.52
环戊烷	565.9	1.38	566.2	1.68
甲基环戊烷	628.4	1.55	629.1	1.84
1,1-二甲基环戊烷	674.2	1.78	674.0	2.06
1,顺-2-二甲基环戊烷	721.4	2.25	716.7	2.49
1,反-2-二甲基环戊烷	689.8	1.50	689.3	1.79
1,顺-3-二甲基环戊烷	683.1	1.45	684.0	1.75
1,反-3-二甲基环戊烷	687.2	1.68	686.7	1.96
正丙基环戊烷	830.6	2.00	823.3	2.26
异丙基环戊烷	812.6	2.65	807.9	2.87
1-甲基-1-乙基环戊烷	794.7	2.50	789.8	2.73
1-甲基-顺-2-乙基环戊烷	821.3	2.43	814.0	2.66
1-甲基-反-2-乙基环戊烷	790.9	2.18	786.2	2.43
1-甲基-顺-3-乙基环戊烷	791.1	1.80	786.2	2.07
1-甲基-反-3-乙基环戊烷	790.2	1.70	786.2	1.98
1-乙基-顺-2-甲基环戊烷	821.4	2.48	815.9	2.71
1-乙基-反-2-甲基环戊烷	791.6	1.90	788.3	2.17
1-乙基-顺-3-甲基环戊烷	788.3	1.83	788.3	2.10
1-乙基-反-3-甲基环戊烷	790.7	2.00	786.2	2.26
1,1,2-三甲基环戊烷	763.8	1.73	761.9	2.01
1,1,3-三甲基环戊烷	723.7	2.03	724.0	2.29

续表

固定液	角鲨烷		OV-101		固定液	角鲨烷		OV-101	
保留指数 / 化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	保留指数 / 化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
1,顺-2,顺-3-三甲基环戊烷	802.6	2.80	800.0	3.00	1,顺-3-二甲基环己烷	785.4	2.45	776.1	2.82
1,顺-2,反-3-三甲基环戊烷	779.5	2.08	776.1	2.33	1,反-3-二甲基环己烷	805.8	2.63	800.0	3.01
1,反-2,顺-3-三甲基环戊烷	748.0	1.58	747.5	1.87	1,顺-4-二甲基环己烷	805.2	2.95	800.0	3.35
1,顺-2,顺-4-三甲基环戊烷	776.2	2.10	773.5	2.35	1,反-4-二甲基环己烷	785.9	2.75	777.7	3.14
1,顺-2,反-4-三甲基环戊烷	773.4	2.20	769.4	2.44	1,1,2-三甲基环己烷	883.7	3.80	874.8	4.21
1,反-2,顺-4-三甲基环戊烷	741.5	1.65	740.5	1.93	1,1,3-三甲基环己烷	840.8	2.80	831.6	3.19
乙基环戊烷	734.3	2.08	731.5	2.33	苯	636.8	2.39	652.7	1.90
环己烷	663.5	2.08	661.2	2.14	甲苯	744.2	2.39	754.5	1.90
甲基环己烷	726.3	2.63	722.1	3.02	乙苯	833.7	2.53	845.5	2.07
乙基环己烷	834.4	2.85	829.5	3.24	1,4-二甲基苯	848.4	2.39	853.7	1.90
1,1-二甲基环己烷	787.2	3.13	781.9	3.53	1,3-二甲基苯	850.4	2.36	853.7	1.87
1,顺-2-二甲基环己烷	829.6	3.00	823.3	3.10	1,2-二甲基苯	868.8	2.72	874.8	2.31
1,反-2-二甲基环己烷	801.8	2.87	794.6	3.26					

表 13-173　C_5～C_9 烃保留指数（五）[120]

固定液：SE-54

I 柱温/℃ / 化合物	50	60	70	80	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I 柱温/℃ / 化合物	50	60	70	80	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
正戊烷	500.0	500.0	500.0	500.0	0.00	2,3,4-三甲基戊烷	750.1	751.6	752.3	—	1.35
正己烷	600.0	600.0	600.0	600.0	0.00	正壬烷	900.0	900.0	900.0	900.0	0.00
2-甲基戊烷	569.5	569.4	569.8	570.1	0.20	2-甲基辛烷	865.6	865.8	865.8	865.8	0.07
3-甲基戊烷	583.8	584.1	584.8	584.9	0.37	3-甲基辛烷	872.1	872.3	872.5	872.8	0.23
2,2-二甲基丁烷	537.1	—	538.9	539.5	0.80	4-甲基辛烷	864.6	865.8	865.8	865.8	0.30
2,3-二甲基丁烷	566.1	—	567.1	—	0.50	3-乙基庚烷	869.0	869.5	—	—	0.50
正庚烷	700.0	700.0	700.0	700.0	0.00	2,2-二甲基庚烷	817.4	819.9	820.2	820.7	1.10
2-甲基己烷	667.4	667.7	—	667.9	0.17	2,4-二甲基庚烷	823.3	823.9	824.2	824.6	0.43
3-甲基己烷	676.3	676.7	677.1	677.5	0.40	2,6-二甲基庚烷	828.2	831.0	832.1	834.2	2.00
3-乙基戊烷	686.6	687.2	—	—	0.60	4,4-二甲基庚烷	830.0	831.0	832.1	834.2	1.40
2,2-二甲基戊烷	624.4	625.1	626.1	626.8	0.80	环戊烷	566.5	—	569.8		1.65
2,3-二甲基戊烷	669.7	671.0	671.7	672.3	0.87	甲基环戊烷	628.3	630.2	632.0	633.7	1.80
2,4-二甲基戊烷	630.4	630.8		—	0.40	1,1-二甲基环戊烷	673.6	676.7	677.1	—	1.75
3,3-二甲基戊烷	656.1	657.7	658.8	-	1.35	1,反-2-二甲基环戊烷	689.0	690.9	692.2	694.3	1.77
2,2,3-三甲基丁烷	637.1	639.1	640.2	641.9	1.60	1,顺-3-二甲基环戊烷	683.7	685.4	686.8	688.8	1.70
正辛烷	800.0	800.0	800.0	800.0	0.00	1,反-3-二甲基环戊烷	686.3	688.1	690.0	691.9	1.87
2-甲基庚烷	766.2	766.5	766.6	—	0.20	乙基环戊烷	732.1	734.3	736.1	738.4	2.10
3-甲基庚烷	773.7	774.1	774.4	774.7	0.33	正丙基环戊烷	823.3	826.3	830.3	—	3.50
4-甲基庚烷	767.7	768.1	—	—	0.40	异丙基环戊烷	807.8	810.3	812.8	815.7	2.63
3-乙基己烷	774.9	775.1	—	—	0.40	1-甲基-1-乙基环戊烷	791.4	—	796.2	800.0	2.87
2,2-二甲基己烷	722.3	722.6	—	—	0.30	1-甲基-反-2-乙基环戊烷	786.0	788.0	789.3	792.1	2.03
2,3-二甲基己烷	760.5	761.3	761.9	—	0.70	1-甲基-顺-3-乙基环戊烷	789.4	791.3	793.5	795.8	2.13
2,4-二甲基己烷	734.2	734.6	—	735.7	0.50	1-甲基-反-3-乙基环戊烷	786.0	788.0	789.3	792.1	2.03
2,5-二甲基己烷	732.1	732.6	—	—	0.50	1-乙基-反-2-甲基环戊烷	789.4	791.3	793.5	795.8	2.13
3,4-二甲基己烷	769.5	770.4	771.4	—	0.95	1,1,2-三甲基环戊烷	761.7	764.2	766.6	-	2.45
2-甲基-3-乙基戊烷	761.7	—	764.1	766.4	1.57	1,1,3-三甲基环戊烷	723.7	—	726.4	729.3	1.87
2,2,3-三甲基戊烷	—	734.6	736.1	738.4	1.90	1,反-2,顺-3-三甲基环戊烷	747.4	749.1	750.7	752.8	1.80
2,2,4-三甲基戊烷	690.1	690.3	—	—	0.70	1,反-2,顺-4-三甲基环戊烷	740.3	742.1	743.7	745.6	1.77

续表

化合物 \ 柱温/℃	50	60	70	80	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	化合物 \ 柱温/℃	50	60	70	80	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
环己烷	661.3	663.8	665.9	667.9	2.20	1,反-4-二甲基环己烷	777.4	780.0	782.4	784.7	2.13
甲基环己烷	721.3	723.8	726.4	729.3	2.67	1,1,3-三甲基环己烷	833.2	836.1	839.9	842.0	2.93
乙基环己烷	828.2	831.0	833.8	837.0	2.93	环庚烷	789.4	792.3	796.2	800.0	3.53
1,1-二甲基环己烷	782.7	785.7	789.3	792.1	3.13	苯	652.2	654.3	656.2	658.6	2.13
1,顺-2-二甲基环己烷	823.3	826.3	830.3	834.2	3.63	甲苯	754.2	756.6	758.7	761.0	2.27
1,反-2-二甲基环己烷	794.1	797.0	800.0	803.2	3.03	乙苯	845.5	848.1	850.4	853.1	2.53
1,顺-3-二甲基环己烷	775.6	778.1	780.4	783.4	2.60	1,4-二甲基苯	853.9	856.4	858.6	861.3	2.47
1,反-3-二甲基环己烷	800.0	803.6	806.2	809.4	3.13	1,3-二甲基苯	853.9	856.4	858.6	861.3	2.47
1,顺-4-二甲基环己烷	800.0	803.6	806.2	809.4	3.13	1,2-二甲基苯	874.9	877.8	880.6	882.8	2.97

表 13-174 C_5～C_{10}烃保留指数(一)[74]

固定液	OV-1	SE-30	OV-1	SE-30	OV-1	SE-30	OV-1	SE-30	OV-1	SE-30	OV-1	SE-30
化合物 \ 柱温/℃	30		40		50		60		70		80	
正戊烷	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0
顺-2-戊烯	513.2	513.1	512.8	512.9	512.2	512.8	511.7	512.7	511.1	512.5	510.5	512.4
反-2-戊烯	504.6	506.4	504.4	505.8	504.1	505.4	503.9	504.8	503.7	504.4	503.1	503.7
正己烷	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0
己烯-1	590.3	589.2	590.3	589.3	590.3	589.4	590.2	589.5	590.2	589.6	590.1	589.7
顺-己烯-3	603.6	603.0	603.5	604.6	603.4	604.2	603.2	603.8	603.1	603.3	602.9	602.8
反-己烯-3	602.8	603.1	602.3	602.4	601.7	601.8	601.1	601.1	600.4	600.4	599.8	599.6
环己烷	659.1	658.7	661.0	660.6	662.9	662.6	665.0	664.8	667.2	667.0	669.4	669.4
苯	651.3	649.9	652.8	651.5	654.3	653.2	655.9	655.0	657.6	656.9	659.3	658.8
2-甲基-1-戊烯	588.7	587.1	588.6	586.8	588.4	586.7	588.3	586.5	588.1	586.3	587.9	586.1
3-甲基-1-戊烯	556.7	557.6	557.2	557.9	557.7	558.1	558.2	558.4	558.7	558.7	559.2	559.0
4-甲基-1-戊烯	557.1	555.5	557.2	555.5	557.2	557.7	557.3	555.8	557.4	555.9	557.5	555.9
2-甲基-2-戊烯	608.0	608.5	607.6	607.9	607.0	607.5	606.5	606.9	605.9	606.4	605.3	605.7
顺-3-甲基-2-戊烯	611.7	611.4	611.5	611.3	611.3	611.2	611.1	611.1	610.9	611.0	610.7	610.8
反-3-甲基-2-戊烯	621.9	621.2	621.5	620.8	621.1	620.6	620.6	620.2	620.1	619.9	619.6	619.4
2,2-二甲基丁烷	535.2	535.3	535.8	535.8	536.4	536.5	537.1	537.2	537.8	537.9	538.5	538.6
2,3-二甲基丁烷	565.0	565.5	565.8	565.8	566.5	566.2	567.3	566.6	568.1	567.0	569.0	567.3
正庚烷	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0
1-庚烯	691.6	690.6	691.3	690.3	690.9	690.1	690.4	689.9	690.1	689.5	689.6	689.2
2,2-二甲基戊烷	625.6	625.7	625.8	625.9	626.0	626.2	626.3	626.4	626.5	626.6	626.7	629.9
2,3-二甲基戊烷	670.8	670.4	671.2	670.8	671.6	671.2	672.1	671.6	672.6	672.1	673.1	672.6
2,4-二甲基戊烷	631.9	632.4	631.8	632.1	631.7	632.0	631.6	631.8	631.6	631.5	631.5	631.3
3,3-二甲基戊烷	656.2	656.3	657.[illegible]	657.1	657.9	657.9	658.7	658.8	659.7	659.6	660.0	660.5
正辛烷	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0
1-辛烯	792.2	791.1	791.4	790.5	790.7	789.9	789.8	789.3	789.1	788.5	788.1	787.8
2,2,4-三甲基戊烷	690.8	690.9	691.3	691.4	691.9	692.0	692.4	692.6	693.1	693.2	693.8	693.8
2,3,4-三甲基戊烷	750.7	750.4	751.4	751.1	752.1	751.8	752.9	752.7	753.7	753.1	754.6	754.3
2,4,4-三甲基-1-戊烯	711.2	712.2	711.9	713.0	713.6	713.4	713.2	713.8	713.9	714.3	711.7	714.7
2,4,4-三甲基-2-戊烷	729.7	730.0	729.5	729.7	729.4	729.4	729.1	729.1	728.9	728.7	728.7	728.4
正壬烷	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0
2,2,5-三甲基己烷	787.7	787.1	787.1	786.8	786.7	786.4	786.1	786.1	785.7	785.6	785.0	785.2
3,5,5-三甲基-1-己烯	768.6	767.9	769.1	768.6	769.6	769.3	770.1	770.0	770.7	770.7	771.2	771.5
正癸烷	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000

表 13-175 $C_5 \sim C_{10}$烃保留指数（二）[16]

固定液：角鲨烷

化合物 \ 柱温/°C（I）	86	115	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	化合物 \ 柱温/°C（I）	86	115	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
正戊烷	500.0	500.0	0.0	反-3-壬烯	886.6	886.5	0.0
己烯	583.1	584.1	0.3	顺-3-壬烯	887.0	888.1	0.4
反-3-己烯	591.4	590.6	0.3	顺-2-壬烯	901.5	902.6	0.4
顺-3-己烯	593.0	593.7	0.2	反-2-壬烯	896.6	896.6	0.0
反-2-己烯	596.7	596.4	−0.1	正壬烷	900.0	900.0	0.0
正己烯	600.0	600.0	0.0	异丙苯	903.5	910.8	2.5
顺-2-己烯	604.6	605.4	0.2	丙苯	932.6	940.2	2.6
苯	646.6	653.6	2.1	间甲乙苯	945.6	952.1	2.2
庚烯	682.8	683.5	0.2	对甲乙苯	948.0	955.1	2.1
反-3-庚烯	687.5	687.4	0.0	邻甲乙苯	961.2	968.8	2.6
顺-3-庚烯	691.7	692.3	0.2	1,3,5-三甲苯	965.3	971.2	2.0
反-2-庚烯	698.7	698.7	0.0	1,2,4-三甲苯	982.2	990.1	2.8
顺-2-庚烯	704.3	705.1	0.3	顺-4-癸烯	982.2	983.4	0.4
正庚烷	700.0	700.0	0.0	反-4-癸烯	982.2	982.7	0.2
甲苯	754.2	760.7	2.2	癸烯	982.2	982.7	0.2
辛烯	782.3	782.9	0.2	反-2-癸烯	996.7	996.6	0.0
反-4-辛烯	784.2	784.1	0.0	顺-2-癸烯	1001.2	1002.2	0.3
顺-4-辛烯	787.9	788.6	0.2	顺-5-癸烯	981.0	982.1	0.4
顺-3-辛烯	789.5	790.2	0.2	反-5-癸烯	984.0	984.7	0.2
反-3-辛烯	788.4	788.0	−0.1	反-3-癸烯	985.4	985.5	0.0
反-2-辛烯	797.7	797.3	−0.1	顺-3-癸烯	985.4	986.4	0.3
顺-2-辛烯	802.8	803.6	0.3	正癸烷	1000.0	1000.0	0.0
正辛烷	800.0	800.0	0.0	1,2,3-三甲苯	1007.5	—	—
乙苯	844.3	851.3	2.4	1,3-二乙苯	1025.0	—	—
对二甲苯	858.1	864.9	2.3	1-甲基-3-正丙苯	1030.5	1037.1	2.3
间二甲苯	860.3	866.3	2.3	丁苯	1033.0	1040.0	2.4
反-4-壬烯	884.2	884.4	0.0	1,2-二乙苯	1036.0	1043.6	2.6
顺-4-壬烯	884.8	886.0	0.4	1-甲基-2-正丙苯	1042.0	1050.5	2.9
邻二甲苯	880.1	888.1	2.7	1,3-二甲基-4-乙苯	—	1070.8	—
壬烯	882.2	882.8	0.2	正十一烷	1100.0	1100.0	0.0

表 13-176 $C_5 \sim C_{10}$烃保留指数（三）[89]

固定液	OV-101	SP-2100	OV-101	SP-2100	OV-101	SP-2100	OV-101	SP-2100	OV-101	SP-2100	OV-101	SP-2100
化合物 \ 柱温/°C（I）	30		40		50		60		70		80	
正戊烷	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0
顺-2-戊烯	515.3	515.5	515.1	515.4	514.9	515.2	514.7	515.1	514.5	514.6	514.2	514.6
反-2-戊烯	507.5	508.0	507.3	507.6	507.0	507.2	506.8	506.8	506.6	506.1	506.3	506.0
环戊烷	563.3	—	564.7	—	566.2	—	567.9	—	569.7		571.5	
正己烷	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0
1-己烯	588.1	589.2	588.2	589.2	588.4	589.0	588.6	588.9	588.8	588.8	589.0	588.7
顺-3-己烯	602.3	602.9	602.4	603.0	602.5	602.8	602.6	602.7	602.8	602.6	602.9	602.5
反-3-己烯	601.7	602.6	601.3	602.2	601.0	601.6	600.6	601.0	600.1	600.4	599.7	599.8
环己烷	655.7	656.7	657.9	658.7	660.3	660.8	662.8	663.0	665.4	665.3	668.2	667.8
苯	647.2	648.2	649.1	649.8	651.1	651.4	653.3	653.2	655.6	655.0	658.0	656.9

续表

固定液	OV-101	SP-2100	OV-101	SP-2100	OV-101	SP-2100	OV-101	SP-2100	OV-101	SP-2100	OV-101	SP-2100
I 柱温/℃ 化合物	30		40		50		60		70		80	
2-甲基戊烷	568.6	—	568.6	—	568.8	—	568.9	—	569.1	—	569.1	—
甲基环戊烷	624.4	—	625.9		627.4	—	629.1	—	630.8	—	632.7	—
3-甲基-1-戊烯	556.5	557.1	556.9	557.7	557.5	558.0	558.1	558.5	558.7	559.0	559.3	559.4
2-甲基-2-戊烯	606.3	607.3	606.1	607.3	606.1	607.0	606.0	606.8	606.0	606.5	605.0	606.3
2-顺-3-甲基-2-戊烯	609.9	610.5	610.0	610.6	610.2	610.6	610.3	610.6	610.5	610.7	610.8	610.8
2-反-3-甲基-2-戊烯	618.9	621.0	620.0	620.6	619.3	620.0	619.5	619.4	619.7	618.8	619.9	618.2
2,2-二甲基丁烷	534.0	535.1	534.6	536.0	535.4	536.6	536.2	537.3	537.0	538.1	537.9	538.8
2,3-二甲基丁烷	563.9	564.8	564.5	565.4	565.2	565.9	565.8	566.5	566.5	567.1	567.3	567.8
正庚烷	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0
2-甲基己烷	666.0	—	666.2	—	666.3	—	666.6	—	666.8	—	667.0	—
3-甲基己烷	674.4		674.8	—	675.1	—	675.6	—	676.0	—	676.5	—
甲基环己烷	714.2	—	717.9	—	722.0	—	726.2	—	730.7	—	735.4	—
甲苯	750.7	—	752.7	—	754.8	—	757.0	—	759.4	—	76 .8	—
2,2-二甲基戊烷	625.3	625.6	625.6	625.9	625.9	626.4	626.4	627.0	626.8	627.5	627.1	628.1
2,3-二甲基戊烷	667.9	669.8	668.9	670.1	669.9	670.7	671.1	671.3	672.2	671.7	673.4	672.3
2,4-二甲基戊烷	631.1	631.8	631.4	631.9	631.6	632.1	631.9	632.5	632.3	632.6	632.6	632.9
3,3-二甲基戊烷	654.4	655.9	655.5	656.8	656.7	657.8	658.0	659.1	659.1	660.1	660.8	661.1
乙基环戊烷	727.1	—	728.9	—	730.7	—	732.8	—	735.1	—	737.3	—
1,1-二甲基环戊烷	669.3	—	671.1	—	672.7	—	674.7	—	676.6	—	678.7	
1,顺-2-二甲基环戊烷	716.9	—	718.5	—	720.1	—	722.0	—	723.6	—	725.5	—
1,反-2-二甲基环戊烷	684.8	—	686.4	—	687.9	—	689.7	—	691.4	—	693.3	—
1,顺-3-二甲基环戊烷	679.5	—	680.9	—	682.5	—	684.3	—	686.0	—	687.9	—
1,反-3-二甲基环戊烷	680.3	—	684.2	—	687.0	—	688.9	—	689.6	—	690.2	—
2,2,3-三甲基丁烷	633.6	—	634.8	—	636.1	—	637.6	—	639.1	—	640.6	
正辛烷	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0
2-甲基庚烷	764.8	—	765.0	—	765.0	—	765.1	—	765.2	—	765.3	—
3-甲基庚烷	771.7	—	772.1	—	772.4	—	772.7	—	773.1	—	773.5	—
4-甲基庚烷	765.8	—	766.1	—	766.4		766.6	—	767.0	—	767.3	
3-乙基己烷	772.3	—	772.9	—	773.4	—	773.9	—	774.6	—	775.2	—
2,2-二甲基己烷	719.6	—	720.7	—	721.8	—	723.0	—	724.3	—	725.8	—
2,3-二甲基己烷	757.5	—	758.3	—	759.1	—	759.9	—	760.8	—	761.8	—
2,4-二甲基己烷	732.9	—	733.5	—	734.0	—	734.7	—	735.4	—	736.1	—
2,5-二甲基己烷	730.2	—	730.6	—	730.8	—	731.1	—	731.5	—	731.8	—
3,3-二甲基己烷	738.4	—	739.2	—	739.9		740.8	—	741.7	—	742.7	—
3,4-二甲基己烷	766.3	—	767.3	—	768.2	—	769.1	—	770.2	—	771.4	
1,顺-3-二甲基环己烷	770.1	—	772.3	—	774.5	—	776.9	—	779.5	—	782.2	—
1,反-4-二甲基环己烷	771.7	—	773.9	—	776.2	—	778.6	—	781.1	—	783.9	—
2-甲基-3-乙基戊烷	758.0	—	759.3	—	760.5	—	761.8	—	763.3	—	764.8	—
2,2,4-三甲基戊烷	687.6	689.2	688.7	689.5	689.8	689.9	691.0	690.2	692.4	690.6	693.8	690.9
2,3,4-三甲基戊烷	747.0	747.7	747.5	748.5	718.9	749.3	750.4	750.2	752.0	751.2	753.7	752.1
1,1,2-三甲基环戊烷	756.1	—	758.3	—	760.5	—	762.9	—	765.4	—	768.0	—
1,1,3-三甲基环戊烷	719.0	—	720.9	—	722.6	—	724.6	—	726.7	—	728.9	—
反2,顺-3-三甲基环戊烷	742.3	—	744.2	—	746.0	—	748.0	—	750.2	—	752.5	—
顺2,反4-三甲基环戊烷	766.4	—	768.7	—	771.1	—	773.7	—	776.4	—	779.3	—
反2,顺4-三甲基环戊烷	736.0	—	737.5	—	739.1	—	740.8	—	742.6	—	744.5	—
2,4,4-三甲基-2-戊烯	724.3	727.5	724.9	727.1	725.5	726.7	726.1	726.3	726.9	725.8	727.7	725.3
正壬烷	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0
2,2,5-三甲基己烷	782.5	783.5	782.9	783.8	783.5	784.2	783.8	784.5	784.4	784.9	784.9	785.3
3,5,5-三甲基-1-己烯	763.8	765.8	764.9	766.4	766.3	767.1	767.5	767.7	768.9	768.4	770.3	769.2
2,2,4,4-四甲基戊烷	766.5	—	768.7	—	771.3	—	773.6	—	776.3	—	779.1	—
正癸烷	1000.0	1000.0	1000.0	1000.6	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0

表 13-177　C_5～C_{10}烃保留指数（四）[90]

固定液：OV-3

I 柱温/℃ 化合物	30	40	50	60	70	80
正戊烷	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0
顺-2-戊烯	519.4	519.3	519.1	519.1	518.9	518.9
反-2-戊烯	511.3	511.1	510.8	510.5	510.2	509.9
正己烷	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0
1-己烯	594.0	594.1	594.3	594.4	594.6	594.8
顺-3-己烯	607.9	607.9	607.9	607.9	607.9	607.9
反-3-己烯	606.9	606.6	606.3	605.9	605.5	605.2
环己烷	664.5	666.8	669.2	671.7	674.4	677.3
苯	671.1	673.0	675.1	677.2	679.5	681.9
氯苯	849.6	852.0	854.6	857.4	860.3	863.3
2-甲基-1-戊烯	592.4	592.4	592.4	592.4	592.5	592.6
3-甲基-1-戊烯	561.1	561.5	562.0	562.4	563.0	563.5
4-甲基-1-戊烯	559.6	559.8	560.0	560.2	560.4	560.7
2-甲基-2-戊烯	611.5	611.3	611.1	610.9	610.7	610.5
顺-3-甲基-2-戊烯	614.8	615.0	615.2	615.5	615.7	616.0
反-3-甲基-2-戊烯	625.0	625.0	625.0	625.0	625.0	625.0
2,2-二甲基丁烷	533.9	534.6	535.4	536.2	537.0	537.9
3,3-二甲基丁烷	565.0	565.6	566.4	567.1	567.9	568.8
正庚烷	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0
1-庚烯	693.9	693.9	693.8	693.8	693.8	693.8
甲基环己烷	723.1	725.4	727.9	730.6	733.3	736.3
甲苯	772.3	774.4	776.7	779.0	781.5	784.2
2,2-二甲基戊烷	622.7	623.2	623.8	624.4	625.1	625.8
2,3-二甲基戊烷	628.7	629.0	629.3	629.6	630.0	630.3
2,4-二甲基戊烷	669.3	670.2	671.1	672.1	673.1	674.2
3,3-二甲基戊烷	654.6	655.9	657.3	658.7	660.3	661.9
正辛烷	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0
1-辛烯	792.5	792.6	792.7	792.8	792.9	793.0
2,2,4-三甲基戊烷	686.6	687.5	688.6	689.6	690.7	691.9
2,3,4-三甲基戊烷	748.3	749.6	751.0	752.5	754.0	755.6
2,4,4-三甲基-1-戊烯	712.0	713.0	714.0	715.2	716.4	717.6
2,4,4-三甲基-2-戊烯	729.5	729.8	730.1	730.5	730.9	731.3
正壬烷	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0
3,5,5-三甲基-1-己烯	766.5	767.6	768.7	770.0	771.2	772.7
正癸烷	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0

表 13-178　C_5～C_{10}烃保留指数（五）[90]

固定液：OV-7

I 柱温/℃ 化合物	30	40	50	60	70	80
正戊烷	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0
顺-2-戊烯	524.6	524.5	524.5	524.4	524.3	524.2
反-2-戊烯	517.0	516.4	515.9	515.2	514.6	513.9
正己烷	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0
1-己烯	598.8	598.5	598.1	597.8	597.4	597.0
顺-3-己烯	612.4	612.1	611.8	611.5	611.2	610.8

续表

I 柱温/℃ 化合物	30	40	50	60	70	80
反-3-己烯	611.5	610.9	610.3	609.7	609.0	608.3
环己烷	672.7	674.9	677.3	679.8	682.4	685.2
苯	693.1	695.0	697.1	699.4	701.7	704.2
氯苯	872.9	876.8	880.9	885.5	889.9	894.9
2-甲基-1-戊烯	596.7	596.5	596.3	596.0	595.7	595.4
3-甲基-1-戊烯	564.5	564.5	564.5	564.5	564.5	564.5
4-甲基-1-戊烯	562.2	562.3	562.4	562.4	562.5	562.6
2-甲基-2-戊烯	616.2	615.8	615.2	614.8	614.3	613.7
顺-3-甲基-2-戊烯	619.8	619.8	619.7	619.6	619.5	619.4
反-3-甲基-2-戊烯	630.7	630.5	630.2	630.0	629.6	629.3
2,2-二甲基丁烷	533.3	533.4	533.5	533.5	533.6	533.7
2,3-二甲基丁烷	565.5	565.7	566.0	566.3	566.7	576.0
正庚烷	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0
1-庚烯	697.7	697.8	697.9	698.2	698.3	698.4
甲基环己烷	729.5	732.0	734.5	737.3	740.2	743.2
甲苯	794.1	796.3	798.6	801.0	803.6	806.3
2,2-二甲基戊烷	621.4	621.8	622.1	622.7	623.1	623.6
2,3-二甲基戊烷	670.1	670.8	671.4	672.3	673.0	673.9
2,4-二甲基戊烷	627.2	627.4	627.5	627.8	627.9	628.1
3,3-二甲基戊烷	655.0	656.3	657.7	659.2	660.7	662.3
正辛烷	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0
1-辛烯	797.1	797.1	797.0	796.9	796.9	796.8
2,2,4-三甲基戊烷	685.7	686.4	686.9	687.5	688.3	688.9
2,3,4-三甲基戊烷	749.3	750.5	751.7	753.0	754.5	755.9
2,4,4-三甲基-1-戊烯	715.0	715.9	716.7	717.7	718.8	719.8
2,4,4-三甲基-2-戊烯	733.0	733.1	733.1	733.1	733.2	733.4
正壬烷	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0
3,5,5-三甲基-1-己烯	767.6	768.7	769.9	771.0	772.3	773.6
正癸烷	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0

表 13-179　C_5～C_{10}烃保留指数（六）[90]

固定液：OV-11

I 柱温/℃ 化合物	30	40	50	60	70	80
正戊烷	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0
顺-2-戊烯	530.8	530.8	530.8	530.8	530.7	530.7
反-2-戊烯	521.4	521.3	521.1	521.0	520.8	520.6
正己烷	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0
1-己烯	603.0	603.4	603.7	604.1	604.4	604.8
顺-3-己烯	617.7	617.7	617.8	617.8	617.9	617.9
反-3-己烯	617.1	616.7	616.3	615.8	615.3	614.8
环己烷	682.3	684.6	686.9	689.4	692.0	694.7
苯	718.4	720.5	722.7	725.1	727.6	730.1
氯苯	904.7	907.6	910.6	914.0	917.5	921.1
2-甲基-1-戊烯	601.5	601.5	601.4	601.3	601.2	601.1
3-甲基-1-戊烯	567.5	568.1	568.6	569.2	569.7	570.4
4-甲基-1-戊烯	565.3	565.4	565.4	565.4	565.4	565.5

续表

I 柱温/℃ 化合物	30	40	50	60	70	80
2-甲基-2-戊烯	621.4	621.6	621.7	621.8	621.9	622.0
顺-3-甲基-2-戊烯	625.1	625.6	626.1	626.7	627.2	627.8
反-3-甲基-2-戊烯	636.9	637.2	637.4	637.7	638.0	638.3
2,2-二甲基丁烷	530.8	531.6	532.3	533.0	533.8	534.6
2,3-二甲基丁烷	564.0	565.1	566.2	567.4	568.6	569.9
正庚烷	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0
1-庚烯	703.2	703.0	702.7	702.5	702.3	702.0
甲基环己烷	737.8	739.8	742.6	745.6	748.8	752.1
甲苯	819.5	821.6	823.8	826.2	828.6	831.2
2,2-二甲基戊烷	619.8	620.3	620.9	621.6	622.3	623.1
2,3-二甲基戊烷	669.7	670.9	672.2	673.6	675.1	676.6
2,4-二甲基戊烷	624.7	625.0	625.1	625.4	625.7	626.0
3,3-二甲基戊烷	655.3	656.7	658.1	659.6	661.2	662.9
正辛烷	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0
1-辛烯	802.6	802.4	802.1	801.8	801.5	801.1
2,2,4-三甲基戊烷	681.9	683.1	684.4	685.7	687.1	688.5
2,3,4-三甲基戊烷	749.9	751.2	752.6	754.0	755.6	757.1
2,4,4-三甲基-1-戊烯	717.4	718.4	719.5	720.6	721.8	722.9
2,4,4-三甲基-1-戊烯	736.1	736.5	736.9	737.3	737.7	738.0
正壬烷	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0
3,5,5-三甲基-1-己烯	769.2	770.4	771.5	772.8	774.0	775.5
正癸烷	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0

表 13-180 C_5～C_{10}烃保留指数（七）[120]

固定液：OV-17

I 柱温/℃ 化合物	30	40	50	60	70	80
正戊烷	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0
顺-2-戊烯	537.5	537.5	537.5	537.4	537.4	537.4
反-2-戊烯	528.0	527.9	527.6	527.4	527.2	526.9
正己烷	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0
1-己烯	609.1	609.3	609.5	609.8	610.1	610.3
顺-3-己烯	623.7	624.0	624.3	624.7	625.1	625.4
反-3-己烯	623.6	623.4	623.1	622.9	622.7	622.4
环己烷	691.5	694.8	698.1	701.8	705.6	709.7
苯	744.6	747.4	750.2	753.4	756.7	760.3
氯苯	932.9	939.0	945.3	952.1	959.1	967.0
2-甲基-1-戊烯	608.6	609.2	609.7	610.4	611.1	611.8
3-甲基-1-戊烯	571.0	571.5	572.0	572.6	573.3	573.9
4-甲基-1-戊烯	571.1	571.6	572.1	572.6	573.3	573.8
2-甲基-2-戊烯	628.8	628.2	627.6	627.0	626.4	625.6
顺-3-甲基-2-戊烯	632.1	632.8	633.5	634.3	635.1	636.0
反-3-甲基-2-戊烯	645.0	645.5	645.9	646.4	646.9	647.5
2,2-二甲基丁烷	529.2	530.0	530.8	531.6	532.6	533.6
2,3-二甲基丁烷	564.1	564.9	565.7	566.6	567.6	568.6
正庚烷	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0
1-庚烯	708.8	709.7	710.6	711.6	712.6	713.7
甲基环己烷	744.2	747.4	750.8	754.3	758.1	762.0

续表

I 柱温/℃ 化合物	30	40	50	60	70	80
甲苯	843.6	846.5	849.4	852.6	855.9	859.3
2,2-二甲基戊烷	617.9	618.8	619.8	620.9	622.0	623.2
2,3-二甲基戊烷	671.1	672.4	673.5	674.9	676.3	677.7
2,4-二甲基戊烷	622.8	623.2	623.4	623.8	624.1	624.5
3,3-二甲基戊烷	655.3	657.1	658.9	661.0	663.1	665.3
正辛烷	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0
1-辛烯	806.2	806.6	806.8	807.2	807.5	807.9
2,2,4-三甲基戊烷	678.2	679.3	680.4	681.7	683.0	684.2
2,3,4-三甲基戊烷	749.1	751.0	753.0	755.1	757.3	759.6
2,4,4-三甲基-1-戊烯	718.9	720.5	722.2	723.9	725.8	727.6
2,4,4-三甲基-2-戊烯	739.3	740.0	740.7	741.5	742.3	743.0
正壬烷	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0
3,5,5-三甲基-1-己烯	768.6	770.2	771.8	773.5	775.3	777.2
正癸烷	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0

表 13-181 C_5～C_{10}烃保留指数(八)[90]

固定液:OV-22

I 柱温/℃ 化合物	30	40	50	60	70	80
正戊烷	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0
顺-2-戊烯	544.4	544.2	544.0	544.0	543.8	543.6
反-2-戊烯	534.8	534.1	533.5	532.8	532.0	531.2
正己烷	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0
1-己烯	613.5	613.3	613.0	612.8	612.4	612.2
顺-3-己烯	630.6	630.5	630.4	630.4	630.3	630.2
反-3-己烯	630.1	629.6	629.0	628.3	627.7	626.9
环己烷	702.2	705.6	709.2	713.0	717.1	721.4
苯	772.8	775.4	778.3	781.4	784.6	788.1
氯苯	965.4	970.9	977.0	983.3	989.9	997.0
2-甲基-1-戊烯	611.2	611.7	612.3	613.0	613.8	614.5
3-甲基-1-戊烯	573.2	573.0	572.8	572.5	572.4	572.1
4-甲基-1-戊烯	573.9	574.0	574.0	574.1	574.2	574.2
2-甲基-2-戊烯	638.4	636.5	634.5	632.4	630.2	627.8
顺-3-甲基-2-戊烯	638.2	638.8	639.5	640.2	640.9	641.8
反-3-甲基-2-戊烯	653.1	653.2	653.3	653.4	653.6	653.7
2,2-二甲基丁烷	513.1	516.0	519.2	522.7	525.4	530.2
2,3-二甲基丁烷	557.5	559.3	561.0	563.0	565.1	567.3
正庚烷	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0
1-庚烯	713.4	713.4	713.6	713.7	713.9	714.0
甲基环己烷	751.1	754.5	758.1	762.0	766.2	770.6
甲苯	871.2	874.4	877.7	881.2	885.2	889.2
2,2-二甲基戊烷	608.2	609.4	610.9	612.5	614.0	615.8
2,3-二甲基戊烷	667.7	668.9	670.4	672.0	673.6	675.3
2,4-二甲基戊烷	616.9	617.3	617.8	618.3	618.8	619.3
3,3-二甲基戊烷	644.2	647.5	651.1	654.9	658.8	663.1
正辛烷	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0
1-辛烯	810.7	811.0	811.3	811.6	812.0	812.4
2,2,4-三甲基戊烷	669.5	671.3	673.4	675.5	677.9	680.3

续表

化合物 \ 柱温 /℃	30	40	50	60	70	80
2,3,4-三甲基戊烷	748.6	750.4	752.4	754.5	756.8	759.1
2,4,4-三甲基-1-戊烯	720.6	722.1	723.8	725.4	727.3	729.3
2,3,4-三甲基-2-戊烯	743.7	744.7	745.7	746.6	747.8	749.8
正壬烷	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0
3,5,5-三甲基-1-己烯	768.0	769.6	771.3	773.1	774.9	776.9
正癸烷	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0

表 13-182　C_5～C_{10}烃保留指数（九）[90]

固定液：OV-25

化合物 \ 柱温 /℃	30	40	50	60	70	80
正戊烷	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0	500.0
顺-2-戊烯	551.8	551.2	550.6	550.0	549.3	548.4
反-2-戊烯	544.4	543.0	541.5	539.8	538.1	536.0
正己烷	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0	600.0
1-己烯	615.9	615.1	613.2	610.1	605.9	600.1
顺-3-己烯	636.9	636.6	636.4	636.1	635.7	635.4
反-3-己烯	635.0	634.6	634.0	633.5	633.0	632.3
环己烷	708.0	712.3	716.7	721.6	726.9	732.7
苯	797.5	799.5	801.8	804.3	806.9	809.9
氯苯	983.1	989.5	996.6	1004.0	1013.0	1022.0
2-甲基-1-戊烯	616.3	613.2	609.8	606.2	602.3	597.9
3-甲基-1-戊烯	571.0	572.1	573.2	574.4	575.9	577.3
4-甲基-1-戊烯	566.8	569.9	572.4	574.4	575.9	576.6
2-甲基-2-戊烯	640.2	639.8	639.5	639.0	638.7	638.2
顺-3-甲基-2-戊烯	640.8	641.9	643.1	644.4	645.9	647.4
反-3-甲基-2-戊烯	657.0	657.5	658.2	658.9	659.7	660.5
2,2-二甲基丁烷	509.7	512.8	516.2	519.7	523.7	527.9
2,3-二甲基丁烷	539.8	544.3	548.9	554.0	559.6	565.6
正庚烷	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0	700.0
1-庚烯	736.8	735.9	735.1	734.1	733.0	731.9
甲基环己烷	750.5	754.8	759.3	764.2	769.4	775.2
甲苯	892.1	895.1	898.4	902.0	905.7	909.8
2,2-二甲基戊烷	598.4	600.8	603.4	606.1	609.1	612.5
2,3-二甲基戊烷	660.7	663.4	656.3	669.4	672.8	676.5
2,4-二甲基戊烷	606.3	608.1	610.2	612.3	614.7	617.3
3,3-二甲基戊烷	650.1	651.0	652.0	653.1	654.3	655.6
正辛烷	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0	800.0
1-辛烯	813.1	813.8	814.2	814.7	815.1	815.6
2,2,4-三甲基戊烷	654.1	658.3	663.0	668.0	673.2	678.9
2,3,4-三甲基戊烷	733.6	738.8	744.5	750.6	757.1	764.1
2,4,4-三甲基-1-戊烯	711.3	714.9	718.9	723.2	727.6	732.5
2,3,4-三甲基-2-戊烯	738.7	741.8	745.2	748.8	752.6	756.7
正壬烷	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0	900.0
3,5,5-三甲基-1-己烯	755.0	759.0	763.1	767.5	772.3	777.6
正癸烷	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0

表 13-183 C_5~C_{10}烃保留指数（十）[130]

固定液：$C_{78}H_{158}$　　柱温：130℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
2,2-二甲基丁烷	540.9	1-戊炔	484.8	顺十氢化萘	1151.0
2,3-二甲基丁烷	573.1	1-己炔	588.2	反十氢化萘	1110.1
2,2-二甲基戊烷	627.9	1-庚炔	688.2	甲基环己烷	757.2
2,3-二甲基戊烷	679.4	1-辛炔	788.1	顺-1,2-二甲基环己烷	866.8
2,4-二甲基戊烷	629.3	1-壬炔	888.5	反-1,2-二甲基环己烷	836.6
2,3-二甲基己烷	765.6	1-癸炔	988.6	顺-1,4-二甲基环己烷	837.4
2,4-二甲基己烷	732.9	2-己炔	642.2	反-1,4-二甲基环己烷	816.0
3,4-二甲基己烷	780.1	3-己炔	621.6	环己烯	704.4
2,2,3-三甲基丁烷	649.7	4-辛炔	810.6	1,3-环己二烯	688.6
2,2,4-三甲基戊烷	694.1	环戊烷	587.6	1,4-环己二烯	724.9
2,3,4-三甲基戊烷	764.2	环己烷	692.8	苯	675.0
1-己烯	587.0	环庚烷	836.0	甲苯	784.0
1-庚烯	685.9	环辛烷	963.9	乙基苯	874.0
1-辛烯	785.3	环癸烷	1177.4	金刚烷	1135.3
1-壬烯	885.2	顺茚满	1033.1	萘	1213.7
1-癸烯	985.1	反茚满	999.8	奠	1329.7

表 13-184 C_5~C_{11}烃保留指数[49]

固定液：四氯苯二甲酸二正丁酯

I　　柱温/℃ 化合物	50	100	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I　　柱温/℃ 化合物	50	100	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
2-甲基丁烷	475.4	476.2	0.16	2-甲基-反-3-壬烯	948.4	950.6	0.44
2-甲基戊烷	569.8	570.9	0.22	2-甲基-顺-3-壬烯	946.8	950.3	0.70
2-甲基己烷	666.3	667.3	0.20	2-甲基-反-4-壬烯	959.3	961.2	0.38
2-甲基庚烷	764.3	756.5	0.24	2-甲基-顺-4-壬烯	967.1	970.3	0.64
2-甲基辛烷	863.6	864.8	0.24	2,2-二甲基-反-3-壬烯	984.4	986.3	0.38
3-甲基戊烷	588.6	590.6	0.40	2,2-二甲基-顺-3-壬烯	1025.8	1030.8	1.00
3-甲基己烷	679.3	681.2	0.38	2,2-二甲基-反-4-壬烯	1001.5	1005.1	0.72
3-甲基庚烷	774.3	776.2	0.38	2,2-二甲基-顺-4-壬烯	1016.7	1022.6	1.18
3-甲基辛烷	871.5	873.3	0.36	环戊烷	574.5	584.5	2.00
3-乙基戊烷	691.7	694.9	0.64	甲基环戊烷	639.7	649.4	1.94
4-乙基庚烷	859.2	861.7	0.50	乙基环戊烷	749.4	760.4	2.20
2,2-二甲基丁烷	539.6	544.4	0.96	1,1-二甲基环戊烷	685.2	698.2	2.60
2,2-二甲基戊烷	625.2	628.9	0.71	1,顺-3-二甲基环戊烷	694.3	703.4	1.82
2,2-二甲基己烷	716.2	719.7	0.70	1,反-2-二甲基环戊烷	707.0	716.0	1.80
2,4-二甲基戊烷	629.1	632.4	0.66	正丙基环戊烷	845.0	855.7	2.14
2,4-二甲基己烷	732.8	736.2	0.68	环己烷	672.0	687.1	3.02
2,4-二甲基庚烷	818.8	821.3	0.50	甲基环己烷	743.4	758.8	3.08
2,5-二甲基己烷	727.2	729.3	0.42	乙基环己烷	852.3	868.9	3.32
2,2,4-三甲基戊烷	692.9	700.4	1.50	正丙基环己烷	945.6	959.9	3.26
2,3,5-三甲基己烷	814.4	820.2	1.16	正丁基环己烷	1039.4	1055.4	3.20
2-甲基-2-壬烯	1010.0	1009.5	-0.10	叔丁基环己烷	996.1	1019.1	4.60

表 13-185 C_5～C_{13}烃保留指数[48]

固定液：$C_{87}H_{176}$

化合物 \ I \ 柱温/℃	70	130	190	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
新戊烷	406.4	409.0	411.6	0.44
2,2 二甲基丁烷	535.1	541.2		1.01
2,3 二甲基丁烷	567.9	573.2	—	0.89
2,2 二甲基戊烷	624.2	327.7	631.2	0.58
2,3-二甲基戊烷	674.3	679.9	685.5	0.94
2,4 二甲基戊烷	626.9	629.5	632.1	0.44
2,2,3-三甲基丁烷	641.5	653.1	664.7	1.93
2,2-二甲基己烷	715.8	719.6	723.4	0.64
2,3 二甲基己烷	761.0	766.0	771.0	0.84
2,4 二甲基己烷	729.6	733.4	737.2	0.63
3,4-二甲基己烷	774.0	780.4	786.8	1.06
2,3,4-三甲基戊烷	755.5	765.6	775.7	1.68
2,2,4 三甲基戊烷	788.6	594.8	701.0	1.68
2,2-二甲基庚烷	811.6	815.8	820.0	0.70
2,2,4,6,6-五甲基庚烷		990.5	1002.9	2.07
1-戊烯	482.5	483.9		0.27
1-己烯	584.5	585.3	586.1	0.14
1 庚烯	683.6	685.2	686.8	0.20
1 辛烯	783.7	784.7	785.9	0.19
1-壬烯	883.4	885.0	886.6	0.26
1-癸烯	—	984.6	986.6	0.34
1 十一烯	--	1084.3	1086.6	0.38
1 十二烯	--	1184.3	1186.6	0.38
1 十二烯	—	1284.4	1286.9	0.42
1 戊炔	484.5	481.9		-0.06
1-己炔	587.3	587.6	587.9	0.05

化合物 \ I \ 柱温/℃	70	130	190	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
1-庚炔	687.1	688.4	689.7	0.22
1-辛炔	785.8	788.3	790.8	0.42
1-壬炔	885.3	888.0	890.7	0.45
1-癸炔	-	986.7	990.6	0.65
环戊烷	575.9	588.3		2.06
环己烷	675.6	694.5	713.4	3.15
环庚烷	811.6	838.8	866.0	4.54
环辛烷	—	966.9	999.2	5.38
环癸烷	—	1180.0	1223.1	7.19
环十二烷	—	1362.7	1412.6	8.32
顺-四氢化茚	—	1034.9	1072.8	6.32
反四氢化茚	—	1000.3	1035.3	5.83
顺十氢化萘	—	1153.9	1198.7	7.47
反十氢化萘		1112.2	1153.4	6.86
苯	659.2	678.8	698.4	3.27
甲苯	766.8	786.5	806.2	3.29
乙基苯	855.2	875.9	896.6	3.45
丙基苯	943.0	965.0	987.0	3.66
丁基苯	—	1064.8	1087.0	3.70
戊基苯	—	1162.0	1183.9	3.65
己基苯	—	1257.7	1281.2	3.91
金刚烷	—	1137.6	1189.5	8.65
四氢化萘	—	1189.7	1231.1	6.90
萘		1215.4	1264.8	8.23
薁	—	1331.2	1388.9	9.62

表 13-186 C_6 烃保留指数[23]

固定液：Arneel　　柱温：22℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
正戊烷	500.0	反-2-己烯	613.4	1 反-3-己二烯	660.1
2,3 二甲基丁烷	564.1	1-反-4-己二烯	618.3	3-己炔	678.5
2-甲基戊烷	568.1	顺-2 己烯	621.4	反-2-反-4-己二烯	695.8
3-甲基戊烷	582.1	1 顺-4-己二烯	624.8	2-己炔	698.3
正己烷	600.0	甲基环戊烷	627.8	正庚烷	700.0
1 己烯	601.0	2,3-己二烯	653.8	顺-2-反-4-己二烯	704.5
1,5-己二烯	601.5	1-己炔	656.2	顺-2-顺-4-己二烯	710.2
反-3-己烯	607.2	1,2-己二烯	658.2		
顺-3-己烯	609.8	1-顺-3-己二烯	659.3		

表 13-187 C_6～C_9 烃保留指数（一）[43]

固定液：Apiezon L

化合物 \ 柱温/℃ (I)	60	80	100	120	140	160
环己烷	677.5	687.5	693.6	696.5	—	—
苯	680.9	687.5	693.9	698.3	—	—
环己烯	694.4	701.6	709.5	715.4		—
1,4-环己二烯	723.8	728.7	736.2	742.4		—
1,3-环己二烯	684.1	690.3	698.3	699.0	—	—
甲基环己烷	740.0	749.4	756.2	757.8	—	
甲苯	788.0	794.0	801.1	805.9	—	
3-甲基环己烯	751.0	759.5	764.7	771.0		—
4-甲基环己烯	754.7	762.7	770.4	776.9	—	
1-甲基环己烯	784.2	790.1	797.5	801.1		—
亚甲基环己烷	751.0	757.7	765.5	769.4	—	—
顺二甲基环己烷	—	826.3	834.8	840.1	850.2	856.2
对二甲基苯		897.2	904.6	911.9	921.8	933.0
顺 1,4-二甲基-2-环己烯	—		—	—	—	—
1,4-二甲基-2-环己烯	—	847.2	854.9	860.8	868.6	874.7
异丙基环己烷	—		951.1	961.2	968.8	977.6
异丙基苯		—	943.1	951.1	961.4	972.0
3-异丙基环己烯		—	—	—	—	—
1-异丙基环己烯	—		943.7	949.3	957.7	967.7
4-异丙基环己烯			967.6	976.3	987.3	999.2
异亚丙基环己烷		—	984.8	991.0	1001.9	1016.2
异丙烯基环己烷	—	—		—		—
顺对盖烷	—	—	—	1027.5	1036.3	1047.3
甲基异丙基苯	—	—	—	1051.3	1061.8	1073.4
2-对盖烯		—	—	1012.8	1020.5	1030.1
3-对盖烯	—	—		1003.8	1010.7	1020.1
1-对盖烯	—	—		1059.0	1069.5	1078.3
1(7)对盖烯	—		—	1029.3	1041.3	1052.6
1(8)对盖烯		—	—	1052.5	1061.0	1072.6

表 13-188 C_6～C_9 烃保留指数（二）[50]

柱温：80℃

固定液	角鲨烷		SE-30		Apiezon L		OV-225		PEG-20M	
化合物 \ 保留指数	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
环己烷	668.1	0.24	669.2	0.24	687.5	0.31	719.9	0.47	740.8	0.47
苯	642.9	0.25	659.1	0.20	687.5	0.32	838.1	0.54	957.1	0.52
环己烯	675.9	0.20	685.1	0.35	701.6	0.39	772.8	0.45	821.5	0.31
甲基环己烷	731.9	0.25	730.9	0.26	749.4	0.34	771.5	0.41	795.2	0.47
甲苯	750.0	0.25	761.4	0.17	794.0	0.35	941.2	0.45	1050.4	0.45
3-甲基环己烯	735.7	0.25	743.3	0.38	759.5	0.26	822.3	0.48	873.1	0.43
4-甲基环己烯	739.5	0.27	742.8	0.27	762.7	0.38	826.6	0.49	883.1	0.48
1-甲基环己烯	766.4	0.20	772.0	0.27	790.1	0.37	851.7	0.44	909.1	0.42
亚甲基环己烷	737.5	0.30	745.5	0.30	757.7	0.39	830.2	0.45	878.7	0.48
顺 1,4-二甲基环己烷	811.9	0.27	809.6	0.32	826.3	0.42	852.9	0.41	867.4	0.38
反 1,4-二甲基环己烷	791.9	0.27	784.1	0.28	806.0	0.35	816.7	0.41	836.4	0.40

续表

固定液 化合物 \ 保留指数	角鲨烷 I	角鲨烷 $10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	SE 30 I	SE 30 $10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	Apiezon L I	Apiezon L $10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	OV-225 I	OV-225 $10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	PEG-20M I	PEG-20M $10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
对二甲苯	854.2	0.26	860.3	0.27	897.2	0.37	1042.0	0.47	1138.2	0.37
顺-3,6-二甲基环己烯	795.5	0.28	790.8	0.29	820.4	0.38	869.1	0.45	923.5	0.42
反-3,6-二甲基环己烯	789.8	0.28	779.3	0.28	801.2	0.36	856.2	0.46	910.2	0.42
1,4-二甲基环己烯	826.7	0.24	827.0	0.35	847.2	0.39	899.5	0.47	946.4	0.36
4-甲基亚甲基环己烷	800.7	0.29	803.5	0.35	820.3	0.40	883.6	0.46	926.2	0.45
异丙基环己烷	926.1	0.28	921.2	0.24	942.6	0.42	972.8	0.48	993.4	0.41
异丙基苯	900.3	0.27	915.5	0.19	933.5	0.48	1091.6	0.42	1173.0	0.34
3-异丙基环己烯	926.1	0.26	926.5	0.33	951.4	0.36	1012.1	0.50	1048.9	0.37
1-异丙基环己烯	919.4	0.23	922.8	0.29	936.5	0.36	1000.4	0.52	1038.4	0.41
4-异丙基环己烯	933.9	0.24	929.5	0.33	957.3	0.51	1022.5	0.50	1065.8	0.44
异亚丙基环己烷	955.3	0.24	960.7	0.31	975.0	0.49	1041.3	0.50	1073.4	0.40
异丙烯基环己烷	920.5	0.24	924.6	0.27	946.3	0.38	1009.0	0.50	1046.6	0.38
顺-1-异丙基-4-甲基环己烷	994.7	0.28	989.9	0.27	1011.2	0.40	1040.3	0.41	1059.1	0.51
反-1-异丙基-4-甲基环己烷	983.9	0.28	979.4	0.24	1001.5	0.37	1038.1	0.41	1049.3	0.51
对甲基-异丙基苯	1003.4	0.28	1015.0	0.26	1030.9	0.51	1188.7	0.38	1264.4	0.31
顺-3-异丙基-6-甲基环己烯	978.2	0.29	981.9	0.27	1007.2	0.41	1072.8	0.42	1078.1	0.44
反-3-异丙基-6-甲基环己烯	976.3	0.29	975.0	0.26	997.2	0.39	1043.9	0.42	1070.6	0.45
1-异丙基-4-甲基环己烯	976.1	0.22	993.1	0.27	990.0	0.34	1042.9	0.49	1075.3	0.40
4-异丙基-1-甲基环己烯	1019.9	0.21	1005.7	0.32	1039.9	0.47	1099.0	0.49	1144.5	0.50
1-异丙基-4-亚甲基环己烷	993.3	0.30	985.5	0.28	1012.7	0.45	1080.9	0.50	1116.9	0.50
1-异亚丙基-4-甲基环己烷	1018.0	0.24	1025.9	0.28	1031.3	0.51	1101.4	0.44	1142.1	0.48
顺-1-异丙基-4-甲基环己烷	995.4	0.24	993.4	0.26	1016.3	0.42	1082.5	0.40	1137.4	0.45
反-1-异丙基-4-甲基环己烷	980.3	0.24	974.1	0.23	1001.1	0.40	1055.4	0.44	1090.2	0.42

表 13-189 C_6～C_9 烃保留指数（三）[19]

固定液	邻苯二甲酸二丁酯	PEG-400		角鲨烷		Apiezon L
化合物 \ I \ 柱温/℃	86	86	120	86	120	120
苯	732.9	1023.3	1035.1	644.4	648.6	673.3
甲苯	836.9	1110.1	1119.7	758.1	756.8	794.2
乙基苯	922.8	1176.8	1196.0	842.6	848.4	886.8
对二甲苯	936.5	1182.0	1201.9	—	—	—
间二甲苯	939.5	1189.2	1211.5	856.6	866.3	904.7
邻二甲苯	965.2	1234.9	1256.2	877.4	886.0	930.9
正丙基苯	1011.9	1254.9	1274.6	931.6	939.0	976.7
对甲基乙基苯	1026.8	—	—	—	952.3	992.3
间甲基乙基苯	1024.9	1267.4	1294.0	—	954.6	996.0
邻甲基乙基苯	1046.6	1306.3	1334.0	—	970.1	1013.4
1,3,5-三甲基苯	1013.9	1284.6	1304.9	964.4	971.4	1012.7
1,2,4-三甲基苯	1065.8	1323.9	1348.0	981.3	990.8	1035.7
苯三甲醇	1097.4	1378.5	1406.5	1006.7	1018.3	1067.6
环戊烷	602.4	—	—	572.0	—	—
甲基环戊烷	650.0	672.4	—	647.3	650.6	642.8
乙基环戊烷	754.8	750.0	—	743.1	747.8	754.0
丙基环戊烷	848.4	855.0	—	848.8	848.2	855.4
环己烷	685.6	737.3	747.5	674.0	682.0	685.4
甲基环己烷	746.7	781.5	805.0	731.5	741.4	751.2
乙基环己烷	851.5	910.8	941.3	840.0	849.9	867.8
丙基环己烷	946.4	1004.1	1033.5	931.6	944.2	961.3
环庚烷	820.9	876.0	914.5	802.6	806.8	837.6
环辛烷	945.9	1044.0	1084.1	924.9	926.6	969.5

表 13-190 C_6～C_{10}烃保留指数（一）[4]

固定液	角鲨烷		Emulphor O		固定液	角鲨烷		Emulphor O	
柱温/°C I 化合物	70	120	70	120	柱温/°C I 化合物	70	120	70	120
环己烷	668	—	710	—	顺-1,4-二甲基环己烷	810	—	844	—
苯	644	—	843	—	对二甲苯	856	—	1040	—
甲基环己烷	730	—	764	—	乙基苯	840	—	1026	—
乙基苯	751		942	—	苯乙烯	867	—	1118	—
反1,2-二甲基环己烷	807	—	837	—	反-十氢化萘	—	1081	—	1158
顺1,2-二甲基环己烷	836	—	875	—	顺-十氢化萘	—	1119	—	1212
邻二甲苯	875	—	1073	—	9,10-八氢化萘	—	1123	—	1253
反1,3-二甲基环己烷	810	—	844	—	四氢化萘	—	1150	—	1400
顺1,3-二甲基环己烷	792	—	816	—	1,2-二氢萘		1148	—	1500
间二甲苯	854	—	1036		1,4-二氢萘	—	1167	—	1466
反-1,4-二甲基环己烷	789	—	814	—	萘		1169	—	1527

表 13-191 C_6～C_{10}烃保留指数（二）[32]

柱温：60°C

固定液	J&W DB-1		H-P PONA		J&W DB-5	
保留指数 化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
2,2-二甲基丁烷	538.0	0.70	538.0	0.73	537.3	0.67
2,3-二甲基丁烷	567.3	0.73	567.3	0.77	567.3	0.68
2-甲基戊烷	569.8	0.20	569.8	0.18	569.3	0.15
3-甲基戊烷	584.4	0.48	584.6	0.45	584.7	0.47
2,2-二甲基戊烷	625.7	0.64	625.7	0.60	624.8	0.53
2,4-二甲基戊烷	631.0	0.26	631.0	0.29	629.7	0.21
2,2,3-三甲基丁烷	639.0	1.43	639.0	1.41	639.4	1.36
2,3-二甲基戊烷	658.1	1.30	658.0	1.31	658.2	1.29
2-甲基己烷	667.8	0.13	667.8	0.11	667.0	0.09
2,3-二甲基戊烷	671.1	0.88	671.2	0.90	671.4	0.80
3-甲基己烷	676.8	0.38	676.8	0.34	676.7	0.33
3-乙基戊烷	687.0	0.53	687.4	0.56	687.7	0.53
2,2,4-三甲基戊烷	691.4	1.13	691.4	1.10	690.0	1.00
2,2-二甲基己烷	722.9	0.45	722.8	0.45	721.7	0.38
2,2,3,3-四甲基丁烷	723.7	2.29	723.7	2.40	725.2	2.44
2,5-二甲基己烷	732.5	0.18	732.5	0.22	731.2	0.11
2,4-二甲基己烷	734.9	0.46	734.9	0.47	733.7	0.38
2,2,3-三甲基戊烷	736.0	1.60	736.1	1.65	736.4	1.53
3,3-二甲基己烷	742.9	1.25	743.0	1.27	742.8	1.21
2,3,4-三甲基戊烷	751.9	1.46	751.9	1.52	752.4	1.44
2,3,3-三甲基戊烷	756.9	2.08	756.9	2.17	758.2	2.06
2,3-二甲基己烷	761.4	0.75	761.4	0.77	761.5	0.71
2-甲基-3-乙基戊烷	763.2	1.06	763.2	1.12	763.5	1.06
2-甲基庚烷	766.5	0.10	766.5	0.16	765.9	0.08
4-甲基庚烷	768.1	0.17	768.1	0.27	767.7	0.16
3,4-二甲基己烷①	770.5	1.08	770.7	1.15	771.2	1.09
3,4-二甲基己烷②	770.5	0.95	770.7	1.02	771.2	0.93
3-甲基-3-乙基戊烷	772.0	1.93	772.1	1.98	773.3	1.90

续表

固定液	J&W DB-1		H-P PONA		J&W DB-5	
化合物 \ 保留指数	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
2,2,4,4-四甲基戊烷	774.0	1.93	774.0	1.98	773.6	1.76
3-甲基庚烷	774.2	0.29	774.2	0.35	773.9	0.25
3-乙基己烷	775.3	0.42	775.5	0.46	775.4	0.42
2,2,5-三甲基己烷	785.1	0.45	785.1	0.47	782.9	0.35
2,2,4-三甲基己烷	792.8	1.33	792.8	1.35	791.6	1.30
2,4,4-三甲基己烷	808.7	1.65	808.7	1.66	808.2	1.58
2,3,5-三甲基己烷	817.0	0.85	817.0	0.82	815.9	0.78
2,2,3,4-四甲基戊烷	819.9	2.35	819.9	2.36	820.9	2.27
2,2-二甲基庚烷	820.0	0.38	820.0	0.40	818.4	0.32
2,4-二甲基庚烷	824.0	0.26	824.0	0.27	822.4	0.25
2,2,3-三甲基己烷	824.7	1.40	824.7	1.42	824.7	1.32
4,4-二甲基庚烷	826.5	1.06	826.4	1.04	825.8	1.06
2,6-二甲基庚烷	830.3	0.12	830.3	0.17	828.8	0.12
2,5-二甲基庚烷	836.9	0.34	836.9	0.40	835.8	0.32
3,5-二甲基庚烷①	837.4	0.80	837.4	0.73	836.6	0.75
3,5-二甲基庚烷①	838.1	0.6	838.1	0.57	837.2	0.55
2,4-二甲基-3-乙基戊烷	838.2	1.85	838.3	1.94	838.7	1.95
2,3,3-三甲基己烷	838.9	1.90	838.9	1.90	839.6	1.90
3,3-二甲基庚烷	839.1	1.13	839.1	1.13	838.7	1.07
2,2,3,3-四甲基戊烷	847.7	2.85	847.4	2.70	850.8	2.88
2,3,4-三甲基己烷①	848.3	1.67	848.3	1.62	848.8	1.72
2,3,4-三甲基己烷①	849.9	1.63	849.9	1.64	850.7	1.72
3,3,4-三甲基己烷	850.8	2.23	850.8	2.24	852.2	2.23
2,3,3,4-四甲基戊烷	854.5	2.78	854.4	2.78	857.1	2.90
2,3-二甲基庚烷	857.3	0.63	857.2	0.66	857.0	0.60
3,4-二甲基庚烷①	859.2	0.90	859.3	0.90	859.5	0.95
3,4-二甲基庚烷①	859.9	0.83	859.9	0.80	860.0	0.80
4-乙基庚烷	861.8	0.35	861.8	0.36	861.2	0.34
4-甲基辛烷	864.6	0.20	864.7	0.16	864.1	0.10
2-甲基辛烷	865.7	0.09	865.7	0.08	865.1	0.06
3-乙基庚烷	871.1	0.38	871.1	0.42	871.0	0.32
3-甲基辛烷	872.2	0.28	872.3	0.26	872.0	0.15
3,3-二乙基戊烷	875.3	2.76	875.4	2.78	877.3	2.78
2,2-二甲基辛烷	918.7	0.33	918.7	0.33	917.3	0.25
4,4-二甲基辛烷	921.0	0.88	921.0	0.90	920.2	0.85
3,5-二甲基辛烷①	924.6	0.53	924.6	0.53	923.3	0.48
3,5-二甲基辛烷①	926.7	0.43	926.7	0.47	925.4	0.43
2,7-二甲基辛烷	930.4	0.13	930.4	0.10	929.0	0.00
2,6-二甲基辛烷	934.9	0.30	934.9	0.30	933.8	0.28
3,3-二甲基辛烷	935.5	1.03	935.5	1.07	934.8	1.00
3,4-二甲基己烷	938.9	1.65	938.9	1.60	938.8	1.68
3,6-二甲基辛烷①	940.0	0.65	939.9	0.60	939.1	0.50
3,6-二甲基辛烷①	940.6	0.55	940.6	0.50	939.9	0.50
2-甲基-3-乙基庚烷	941.7	0.85	941.7	0.87	941.1	0.83
3,4,5-三甲基庚烷①	945.9	1.70	946.1	1.80	946.8	1.80
4-丙基庚烷	946.2	0.20	946.2	0.20	945.0	0.15
3,4,5-三甲基庚烷①	946.8	1.60	946.8	1.60	947.6	1.65

续表

固定液	J&W DB-1		H-P PONA		J&W DB-5	
化合物 \ 保留指数	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
3-甲基-3-乙基庚烷	947.8	1.70	947.7	1.70	947.9	1.63
2,3-二甲基辛烷	954.6	0.57	954.6	0.65	954.3	0.60
4-乙基辛烷	956.1	0.25	956.2	0.30	955.5	0.20
5-甲基壬烷	960.8	0.05	960.8	0.08	960.2	0.03
4-甲基壬烷	962.5	0.13	962.5	0.10	961.8	0.03
2-甲基壬烷	965.2	0.05	965.1	0.07	964.5	0.05
3-乙基辛烷	967.9	0.38	968.0	0.40	967.6	0.37
3-甲基壬烷	971.2	0.28	971.3	0.23	970.9	0.25
环戊烷	567.8	1.50	568.0	1.55	573.3	1.53
甲基环戊烷	630.4	1.63	630.5	1.63	635.0	1.66
环己烷	663.7	2.33	664.0	2.31	670.1	2.36
1,1-二甲基环戊烷	675.9	1.80	676.0	1.86	679.6	1.84
1,顺-3-二甲基环戊烷	685.5	1.55	685.6	1.62	688.6	1.61
1,反-3-二甲基环戊烷	688.3	1.58	688.4	1.62	691.6	1.66
1,反-2-二甲基环戊烷	690.9	1.61	691.0	1.64	694.3	1.61
1,顺-2-二甲基环戊烷	722.6	2.16	722.8	2.22	727.6	2.19
甲基环己烷	724.0	2.49	724.1	2.53	729.4	2.50
1,1,3-三甲基环戊烷	726.0	1.84	726.1	1.92	727.7	1.79
乙基环戊烷	734.3	1.94	734.5	2.00	739.2	1.99
1,反-2,顺-4-三甲基环戊烷	742.3	1.59	742.4	1.68	743.7	1.57
1,反-2,顺-3-三甲基环戊烷	749.4	1.60	749.5	1.70	751.4	1.57
1,1,2-三甲基环戊烷	764.4	2.39	764.6	2.47	768.2	2.39
1,顺-2,反-4-三甲基环戊烷	775.0	2.09	775.2	2.18	778.2	2.07
1,顺-3-二甲基环己烷	778.4	2.33	778.5	2.42	782.5	2.36
1,顺-2,反-3-三甲基环戊烷	779.0	2.21	779.0	2.28	782.6	2.24
1,反-4-二甲基环己烷	780.2	2.31	780.3	2.40	784.0	2.33
1,1-二甲基环己烷	786.1	2.80	786.3	2.90	790.9	2.76
1-甲基-反-3-乙基环戊烷	788.3	1.85	788.4	1.86	791.4	1.90
1-甲基-顺-3-乙基环戊烷	790.4	1.91	790.5	1.97	793.8	1.90
1-甲基-反-2-乙基环戊烷	791.8	1.92	791.8	2.00	795.2	2.02
1-甲基-1-乙基环戊烷	794.3	2.40	794.4	2.46	798.9	2.46
1,反-2-二甲基环己烷	797.4	2.80	797.5	2.88	802.1	2.85
1,顺-2,顺-3-三甲基环戊烷	802.7	2.67	802.8	2.82	807.3	2.74
1,反-3-二甲基环己烷	803.9	2.48	804.1	2.62	809.2	2.74
1,顺-4-二甲基环己烷	804.1	2.64	804.2	2.67	809.3	2.65
异丙基环戊烷	810.4	2.65	810.5	2.62	815.1	2.78
1-甲基-顺-2-乙基环戊烷	820.3	2.37	820.3	2.40	825.4	2.50
1,顺-2-二甲基环己烷	826.6	3.13	826.8	3.18	833.0	3.15
正丙基环戊烷	830.1	2.00	830.2	2.00	834.9	2.08
乙基环己烷	831.3	2.68	831.4	2.72	837.2	2.85
1,1,3-三甲基环己烷	836.5	2.75	836.6	2.73	840.1	2.84
1,1,4-三甲基环己烷	838.9	2.90	839.1	2.98	842.2	2.97
1,1,2-三甲基环己烷	878.7	3.67	878.9	3.68	884.2	3.80
正丁基环戊烷	929.4	2.00	929.5	2.03	931.1	2.10
苯	653.8	1.88	654.2	1.96	670.6	2.09
甲苯	756.2	2.05	756.5	2.17	772.7	2.16
乙基苯	847.8	2.38	848.1	2.42	865.0	2.44

续表

固定液	J&W DB-1		H-P PONA		J&W DB-5	
化合物 \ 保留指数	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
间二甲苯	856.1	2.27	856.4	2.30	872.4	2.43
对二甲苯	857.1	2.24	857.4	2.28	873.0	2.40
邻二甲苯	877.6	2.75	877.8	2.80	895.7	2.98
异丙基苯	909.3	2.48	909.7	2.50	926.3	2.55
正丙基苯	937.7	2.50	937.9	2.60	954.6	2.67
3-乙基甲苯	945.0	2.38	945.4	2.37	962.2	2.50
4-乙基甲苯	947.1	2.50	947.4	2.50	963.7	2.65
1,3,5-三甲基苯	952.7	2.43	953.0	2.40	968.8	2.63
2-乙基甲苯	961.1	2.85	961.4	2.90	979.7	3.03
叔丁基苯	974.9	2.80	975.2	2.83	992.0	2.90
1,2,4-三甲基苯	975.6	2.88	975.9	2.93	992.6	3.10
异丁基苯	990.5	2.80	990.8	2.83	>1000	—
仲丁基苯	992.8	2.95	993.2	2.93	>1000	·
1,2,3-三甲基苯	999.9	3.45	>1000	—	>1000	—

①立体异构体。

表 13-192 C_8 炔与二炔的保留指数[56]

固定相	角鲨烷	Ucon LB550X	Ucon50 HB280X	PEG-1000	石墨化炭黑
I \ 柱温/℃ \ 化合物	50	50	50	50	140
1-庚炔	685.3	794.1	838.3	915.9	662
1-辛炔	784.5	894.5	938.4	1011.8	759
2-辛炔	845.2	935.6	971.3	1033.5	769
3-辛炔	820.7	901.6	933.6	988.4	746
4-辛炔	813.6	891.6	923.2	976.6	743
1,3-辛二炔	848.3	1051.7	1136.4	1272.6	779
1,4-辛二炔	811.8	1027.5	1112.6	1261.6	720
1,5-辛二炔	800.9	994.2	1071.3	1204.0	718
1,6-辛二炔	825.0	1022.4	1105.2	1248.3	717
1,7-辛二炔	769.2	993.4	1086.0	1247.6	713
1-辛烯	781.6	808.2	820.0	840.3	775
反-3-辛烯	789.0	814.4	824.3	845.5	769
1,反-3-辛二烯	809.3	868.2	895.2	938.1	804
1,7-辛二烯	762.6	816.3	839.6	878.5	756
苯	636.8	750.5	808.0	923.4	—
2-戊酮	620.3	780.4	845.3	968.2	—
正丁醇	600.2	904.8	986.5	1168.7	—

表 13-193 C_8、C_9 炔保留指数[98]

固定液：角鲨烷　　柱温：70℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
苯	641.51	2-辛炔	843.45	邻二甲苯	874.17
环己烷	667.14	3-辛炔	819.28	1-壬炔	883.78
1-辛炔	783.52	4-辛炔	812.50		

表 13-194　环己烷及其衍生物的保留指数[30]

固定液	SE-30			聚乙二醇-20M			EGSS-X		
I 柱温/℃ 化合物	120	140	160	120	140	160	120	140	160
反 4-叔丁基环己醇	1205	1214	1223	1666	1677	1687	1854	1878	1902
顺-4-叔丁基环己醇	1205	1214	1223	1709	1720	1730	1889	1921	1953
反 4-叔丁基乙酸环己酯	1333	1341	1350	1639	1655	1671	1779	1827	1875
顺 4-叔丁基乙酸环己酯	1382	1389	1397	1704	1720	1737	1850	1906	1962
反-4-叔丁基环己酮基环己烷	1784	1805	1826	2085	2128	2171	2285	2349	2413
顺-4 叔丁基环己酮基环己烷	1826	1850	1874	2187	2227	2267	2390	2461	2532
反-4-叔丁基哌啶基环己烷	1545	1562	1580	1672	1701	1731	1741	1783	1825
顺 4-叔丁基哌啶基环己烷	1612	1631	1650	1844	1865	1887	1891	1955	2019
反 4-叔丁基-1-甲基-1-(氰基乙酸乙酯基)环己烷	1729	1743	1757	2166	2214	2262	2511	2571	263.
顺 4 叔丁基-1-甲基 1-(氰基乙酸乙酯基)环己烷	1781	1796	1811	2228	2295	2362	2621	2683	2745
环己醇	874	879	883	1377	1386	1396	1536	1566	1596
甲酸环己酯	1051	1056	1061	1385	1399	1414	1488	1540	159
二环己基甲酮	1535	1550	1565	1883	1920	1957	2110	2167	2224
环己基哌啶	1317	1329	1340	1535	1553	1571	1685	1721	1757
1-甲基-1-(氰基乙酸乙酯基)环己烷	1487	1498	1508	2005	2050	2095	2364	2420	2476
环己烷	663	668	674	726	732	738	—	—	—
叔丁基环己烷	1003	1012	1021	1062	1075	1088	—	—	—

表 13-195　部分芳烃及环烯烃的保留指数[107]

固定液:Emulphor-O　　柱温:130℃

化合物	*I*	化合物	*I*	化合物	*I*
1-苯基丙烷	1136	2-苯基-4-甲基戊烷	1289	环己基-2-环己烯	1436
1-苯基丁烷	1219	3-苯基-2 戊烯	1362	环己基-3-环己烯	1447
1-苯基戊烷	1313	2-苯基-4-甲基-2-戊烯	1413	苯基环己烷	1521
1-苯基己烷	1417	3-苯基-3-己烯	1434	苯基-2,6-环已二烯	1592
叔戊基苯	1254	2-苯基-2-己烯	1490	苯基-1-环己烯	1645
3-苯基戊烷	1232	二环己烷	1390	联苯	1712
3-苯基己烷	1310	环己基-1-环己烯	1422		

表 13-196　长链烷基苯保留指数 (一)[4]

固定液	Apiezon L		聚苯醚 OS-138		固定液	Apiezon L		聚苯醚 OS-138	
I 柱温/℃ 化合物	150	200	200	215	*I* 柱温/℃ 化合物	150	200	200	215
1-苯基庚烷	1376	1396	1553	1557	6-苯基十一烷	—	1625	1758	1763
2-苯基庚烷	1300	1320	1469	1473	2-苯基十二烷	—	1813	1960	1960
3-苯基庚烷	1266	1285	1427	1431	3-苯基十二烷	—	1767	1907	1911
4-苯基庚烷	1260	1278	1415	1419	4 苯基十二烷	—	1741	1879	1881
1-苯基癸烷	—	1694	1851	1856	5-苯基十二烷	—	1725	1861	1864
2-苯基癸烷	—	1616	1765	1769	6-苯基十二烷	—	1718	1854	1856
3 苯基癸烷	—	1573	1710	1715	2-苯基十三烷	—	1911	2058	2059
4 苯基癸烷	—	1550	1684	1688	3-苯基十三烷	—	1865	2006	2007
5 苯基癸烷	—	1537	1670	1674	4-苯基十三烷	—	1838	1977	1978
2 苯基十一烷	—	1715	1861	1864	5-苯基十三烷	—	1821	1960	1962
3-苯基十一烷	—	1670	1808	1813	6-苯基十三烷	—	1813	1950	1950.5
4-苯基十一烷	—	1645	1780	1785	7-苯基十三烷	—	1813	1950	1950
5-苯基十一烷	—	1631	1765	1769					

表 13-197 长链烷基苯保留指数（二）[46]

固定液：OV-101　　柱温：185℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
5-苯基壬烷	1437	6-苯基十一烷	1625	3-苯基十二烷	1758
4-苯基壬烷	1443	5-苯基十一烷	1628	2-苯基十二烷	1797
3-苯基壬烷	1460	4-苯基十一烷	1638	7-苯基十三烷	1818
2-苯基壬烷	1492	3-苯基十一烷	1659	6-苯基十三烷	1819
5-苯基癸烷	1528	2-苯基十一烷	1696	5-苯基十三烷	1825
4-苯基癸烷	1538	6-苯基十二烷	1718	4-苯基十三烷	1838
3-苯基癸烷	1560	5-苯基十二烷	1722	3-苯基十三烷	1866
2-苯基癸烷	1595	4-苯基十二烷	1734	2-苯基十三烷	1906

表 13-198 长链烷基环烷及长链烷基苯保留指数[105]

固定液	OV-1			Dexsil 300			SE-52			Apiezon L			Carbowax 20M		
化合物	柱温/℃	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	柱温/℃	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	柱温/℃	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	柱温/℃	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	柱温/℃	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
环戊基十四烷	190	1961.7	3.1	190	1977.9	3.3	190	1966.8	2.7	190	1975.4	2.9	150	1986.7	4.7
环戊基十六烷	190	2162.5	3.0	190	2178.7	3.3	190	2167.4	2.8	190	2175.9	2.9	150	2184.4	4.7
环戊基十八烷	190	2363.4	3.0	190	2379.5	3.2	190	2368.1	2.8	190	2376.4	2.8	150	2382.2	4.6
环己基十四烷	210	2071.6	4.0	210	2093.5	4.6	210	2079.1	4.2	190	2084.7	5.2	170	2106.0	6.7
环己基十六烷	210	2272.5	3.9	210	2295.4	4.5	210	2280.1	4.3	190	2285.7	5.1	170	2304.2	6.7
环己基十八烷	210	2473.4	4.0	210	2497.3	4.5	210	2481.1	4.3	190	2486.7	5.2	170	2502.4	6.6
苯基十四烷	210	2082.2	4.6	210	2117.9	4.5	210	2089.9	4.3	210	2104.3	3.2	190	2316.5	9.5
苯基十六烷	210	2281.5	4.5	210	2320.0	4.6	210	2292.1	4.3	210	2306.7	3.1	190	2514.7	9.4
苯基十八烷	210	2482.8	4.5	210	2522.1	4.5	210	2494.3	4.4	210	2509.1	3.2	190	2712.9	9.6

表 13-199 环烷基苯保留指数[39]

固定液	聚乙二醇-20M			Apiezon L	有机皂土 34 DC-710(1：1)	有机皂土 34 DC-710(3：7)
化合物 ＼ I ＼ 柱温/°C	130	140	150	150	150	150
环戊基苯	1584	1593	1602	1264	1365	1362
1-甲基-1 环戊基苯	1605	1616	1626	1302	1396	1379
环戊基苯基甲烷	1638	1648	1660	1331	1432	1430
环己基苯	1672	1684	1694	1360	1456	1459
环己基环己烷	1468	1480	1490	1363	1374	1376
联苯	—	—	2040	1420	1660	1618
环己基氯	—	—	1200	930	1021	1016

表 13-200 轻油组分保留指数（一）[131]

固定液：HP-1　　柱温：60℃

化　合　物	I	化　合　物	I
丁烯	406.3	吡咯	843.1
二甲醚	483.1	乙基苯	847.7
2,2-二甲基戊烷	625.2	间二甲苯＋对二甲苯	857.4
苯	655.2	2-甲基辛烷	866.0
吡啶	729.0	苯乙烯	873.3
甲苯	755.7	邻二甲苯	877.6
2-甲基吡啶＋3,4-二甲基己烷	799.8	异丙基苯＋异丙基己烷	909.1
2,5 二甲基庚烷	837.2	环辛烷＋2,4-二甲基吡啶	911.4

续表

化合物	I	化合物	I
3,5-二甲基辛烷+烯丙基苯	927.3	对正丙基甲苯	1034.4
正丙基苯	937.7	间甲酚+对甲酚+正丁基苯	1036.9
苯酚+3-乙基甲苯	943.7	邻二乙基苯	1041.3
1,3,5-三甲基苯	952.4	1-甲基-2-正丙基苯	1044.0
5-甲基壬烷+1-甲基-2-乙基苯	960.8	1,4-二甲基-2-乙基苯	1060.3
苯胺	966.8	1,2-二甲基-4-乙基苯	1061.8
苯并呋喃	969.4	叔戊基苯+1-甲基-3-叔丁基苯	1067.1
顺-β-甲基苯乙烯	972.9	4-乙基-乙烯基苯+1-甲基-4-叔丁基苯	1072.1
1,2,4-三甲基苯+叔丁基苯	974.8	2,5-二甲基苯乙烯	1075.7
异丁基苯	989.7	1,2,4,5-四甲基苯+1-乙基-4-异丙基苯	1092.9
仲丁基苯	997.3	2,4-二甲基酚+1,3-二甲基-5-异丙基苯	1094.3
间异丙基甲苯	999.0	2,5-二甲基酚+1-甲基-2-仲丁基苯	1095.0
1,2,3-三甲基苯	1001.6	1,2,3,4-四甲基苯	1096.1
邻甲酚+对异丙基甲苯	1007.6	异戊基苯	1099.3
茚	1015.5	1,4-二甲基-2-异丙基苯	1108.4
间烯丙基甲苯	1023.0	1-乙基-3-正丙基苯	1114.1
正丁基环己烷	1024.9	1-甲基-2-异烯丙基苯+4-甲基茚	1116.6
1,3-二乙基苯	1029.5	1,3-二乙基-5-甲基苯	1119.5
间正丙基甲苯	1031.8	萘	1139.4

表 13-201 轻油组分保留指数（二）[131]

固定液：HP-1　　柱温：100℃

化合物	I	化合物	I
乙醚	540.8	2,4-二甲基苯乙烯	1082.0
苯	663.8	2,5-二甲基苯乙烯+N,N-二甲基苯胺	1087.0
吡啶	738.1	2,6-二甲基苯酚	1096.1
甲苯	766.4	1,2,4,5-四甲基苯	1105.5
1-甲基-1-乙基环戊烷	804.8	1,2,3,5-四甲基苯	1109.1
1,1,4-三甲基环己烷	850.2	邻乙基苯酚	1117.5
乙基苯	858.7	1,3-二甲基-4-异丙基苯	1123.5
间二甲苯+对二甲苯	866.6	2,4-二甲基酚+2,5-二甲基酚	1131.5
苯乙烯	884.6	1,2,3,4-四甲基苯+3,5-二甲基酚	1139.2
邻二甲苯	888.8	1,2,3,4-四氢化萘+2,3-二甲基酚	1143.0
异丙基苯	919.1	萘	1164.6
环辛烷	929.1	苯并[b]噻吩+3,4-二甲基酚	1168.4
苯酚+3-乙基甲苯	954.2	1-乙基-2-仲丁基苯	1177.1
1,3,5-三甲基苯	961.7	1,2,5-三甲基-5-乙基苯+1-乙基-4-仲丁基苯	1179.8
苯胺	967.8	1,4-二甲基-2-仲丁基苯	1184.2
苯并呋喃	975.7	喹啉	1190.3
1,2,4-三甲基苯	986.2	1-乙基-4-正丁基苯	1206.8
1,2,3-三甲基苯	1013.8	1,3-二甲基-4-正丁基苯+1-甲基-2-正戊基苯	1231.3
邻甲酚+1-甲基-2-异丙基苯	1029.3	1,2,4-三甲基-5-正丙基苯	1249.1
茚	1034.1	2-甲基萘	1252.3
间甲酚+对甲酚	1049.9	1-甲基萘	1264.3
1-甲基-2-正丙基苯	1059.2	1,2,3-三甲基-4-正丙基苯	1277.4
1,3-二甲基-4-乙基苯+1,4-二甲基-2-乙基苯	1068.2	联苯	1296.9
1,2-二甲基-4-乙基苯+3-乙基苯乙烯	1074.3		1340.1

表 13-202　煤焦油（170～210℃）组分保留指数[138]

固定液：OV-1　　柱温：150℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
甲苯	780.0	间乙基苯酚	1142.7	1-,2-乙基萘	1392.7
1,3,5-环庚三烯	806.8	3,5-二甲基苯酚	1150.6	2,7-,2,6-二甲基萘	1400.0
间,对二甲苯	876.0	2,3-二甲基苯酚,1-甲基十氢化萘	1158.7	1,3-,1,7-二甲基萘	1413.6
异丙苯	930.0			1,4-二甲基萘	1417.5
苯酚	949.6	萘	1196.8	1,6-二甲基萘	1431.1
异丁基苯	972.6	2,3,5-三甲基苯酚	1234.8	2,3-二甲基萘	1433.0
1,2,4-三甲基苯	1006.5	2-甲基-4-乙基苯酚	1252.9	1,5-二甲基萘	1440.0
邻甲酚,对异丙基甲苯	1032.4	N-甲基吲哚	1269.3	1,2-二甲基萘	1446.8
对甲酚	1052.2	2-乙基十氢化萘	1289.6	苊	1472.0
间甲酚,茚	1058.9	2-甲基萘	1300.0	二苯并呋喃	1504.2
2,6-二甲基苯酚	1097.0	1-甲基萘	1317.8	全氢化菲	1513.9
邻乙基苯酚	1111.6	喹啉	1349.3	全氢化蒽	1518.3
2,4-,2,5-二甲基苯酚	1126.5	联苯	1369.0	芴	1557.1

表 13-203　煤焦油（210～230℃）组分保留指数[138]

固定液：OV-1　　柱温：150℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
间,对二甲苯	876.2	萘	1196.4	1,6-二甲基萘	1431.1
异丙苯	930.0	2,3,5-三甲基苯酚	1235.2	2,3-二甲基萘	1433.0
苯酚	949.5	N-甲基吲哚	1269.3	1,5-二甲基萘	1440.0
异丁基苯	972.6	2-甲基萘	1299.6	1,2-二甲基萘	1447.5
1,2,4-三甲基苯	1006.5	1-甲基萘	1317.8	苊	1472.3
邻甲酚,对异丙基甲苯	1032.4	7-甲基吲哚	1346.0	3-甲基联苯	1477.9
茚,对甲酚,间甲酚	1052.0	喹啉	1349.7	2,3,6-三甲基萘	1532.5
2,6-二甲基苯酚	1100.0	联苯	1369.0	2,3,5-三甲基萘	1547.4
邻乙基苯酚	1111.6	1-,2-乙基萘	1392.7	芴	1557.1
2,4-,2,5-二甲基苯酚	1126.5	2,7-,2,6-二甲基萘	1400.0	9,10-二氢化蒽	1703.5
间乙基苯酚	1142.7	1,3-,1,7-二甲基萘	1414.0		
2,3-二甲基苯酚	1158.7	1,4-二甲基萘	1417.5		

表 13-204　煤焦油（230～270℃）组分保留指数[138]

固定液：OV-1　　柱温：150℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
甲苯	779.1	萘	1196.8	苊	1475.0
1,3,5-环庚三烯	802.3	2,3,5-三甲基苯酚	1236.4	3-甲基联苯	1479.5
间,对二甲苯	876.2	2-乙基十氢化萘	1258.2	全氢化蒽	1499.5
N-正丙基吡咯	910.1	N-甲基吲哚	1270.0	二苯并呋喃	1504.5
苯酚	949.6	2-甲基萘	1300.6	三甲基萘,1-,2-萘酚	1516.9
异丁基苯	972.6	1-甲基萘	1318.3	三甲基萘,N-甲基吲哚	1522.0
1,2,4-三甲基苯	1006.5	7-甲基吲哚	1345.6	2,3,6-三甲基萘	1533.2
邻甲酚、对异丙基苯	1032.4	喹啉	1350.2	2,3,5-三甲基萘	1551.7
对甲酚	1052.1	联苯	1370.2	芴	1557.3
茚、间甲酚	1058.6	1,2-乙基萘	1393.4	6-异丙氧基二氢吲哚	1577.1
2,6-二基苯酚	1100.0	2,6-,2,7-二甲基萘	1401.0	甲基二苯并呋喃	1600.2
邻-乙基苯酚	1113.0	1,3-,1,7-二甲基萘	1414.7	甲基二苯并呋喃	1612.5
2,4-,2,5-二甲基苯酚	1126.8	1,4-二甲基萘	1418.2	氧杂蒽,6-乙氧基吲哚	1619.7
间乙基苯酚	1143.0	1,6-二甲基萘	1431.2	菲	1730.1
2,3-二甲基苯酚,1-甲基十氢化萘	1158.7	2,3-二甲基萘	1433.8	蒽	1738.6
		1,2-二甲基萘	1447.1	咔唑	1744.5

表 13-205 煤焦油（270～300℃）组分保留指数[138]

固定液：OV-1　　柱温：160℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
N 正丙基四氢吡咯	882.2	联苯	1377.5	3,3′-二甲基联苯	1590.9
1,5-环辛二烯	958.7	1-,2-乙基萘	1400.0	9,10-二氢化蒽	1652.2
苯酚,异丙基苯	973.6	2,6-,2,7-二甲基萘	1408.3	9,10-二氢化菲	1666.0
对甲酚	1034.1	1,3-,1,7-二甲基萘	1423.1	2-甲基芴	1675.8
间甲酚,茚	1036.0	1,4-二甲基萘	1438.9	1 甲基芴	1679.5
邻乙基苯酚	1106.2	1,6 二甲基萘	1443.1	4-甲基芴	1690.1
3,5-二甲基苯酚	1146.4	1,5-二甲基萘	1447.9	二甲基苊	1702.6
2,3-二甲基苯酚	1159.8	1,2-二甲基萘	1455.5	N-甲基咔唑	1710.3
萘	1203.9	2,3-二甲基吲哚	1476.4	菲	1745.3
2,3,5 三甲基苯酚	1245.8	苊	1486.1	蒽	1752.4
1-乙基十氢化萘	1269.3	4 甲基联苯	1503.5	咔唑	1780.7
N-甲基吲哚	1276.8	全氢化蒽	1528.5	1-苯基萘	1818.0
2-甲基萘	1307.2	2,3,6-三甲基萘	1541.9	3-甲基菲	1846.7
1 甲基萘	1325.6	2,3,5-三甲基萘	1557.5	2 甲基菲	1850.9
7-甲基吲哚	1353.1	芴	1573.5	4-甲基菲	1862.8

参 考 文 献

1 Boneva S, Dimov N. Chromatographia, 1986; 21: 149

2 Antheaume J, Guiochon G. Bull Soc Chim (Fr), 1965; 298

3 Evans M B. J Gas Chrom, 1966; 4: 1

4 Schomburg G. J Chromatogr, 1966; 23: 18

5 Zulaica J, Guiochon G. Bull Soc Chim (Fr) 1966; 1351

6 Tourres D A. J Gas Chrom, 1967; 5: 35

7 Tourres D A. J Chromatogr, 1967; 30: 357

8 Hively R A, Hinton R E. J Gas Chrom, 1968; 6: 203

9 Loewenguth J C, Tourres D A. Z Anal Chem, 1968; 236: 170

10 Matukuma A. In Harbourn C L, Stock R, ed. Gas Chromatography 1968. London: Inst of Petroleum, 1969: 55

11 Schomburg G, Henneberg D. In Harbourn C L, Stock R, ed. Gas Chromatography 1968, London: Inst of Petroleum, 1969: 45

12 Sojak L, Hrivnak J. Ropa Uhile, 1969; 11: 361

13 Cramers C A, Rijks J A, Pacakova V, et al. J Chromatogr, 1970; 51: 13

14 Hala S, Eyem J, Burkhard J, et al. J Chem Sci, 1970; 8: 203

15 Mitra G D, Saha N C. J Chrom Sci, 1970; 8: 95

16 Sojak L, Bucinska. J Chromatogr, 1970; 51: 75

17 Hala S, Kuras M, Popl, et al. Erdol-Kohle-Erdge-Petrocheme, 1971; 24: 87

18 Wallaert B. Bull Soc Chim (Fr), 1971: 1107

19 Agrawal B B, Tesarik K. Janak J. J Chromatogr, 1972; 65: 207

20 Eisen O, Orav A, Rang S. Chromagraphia, 1972; 5: 229

21 Grimmer G, Bohnke H. Z anal Chem, 1972; 261: 312

22 三户岡想之. 分析化学, 1972; 21: 1447

23 Meltzow W, Warwel S, Fell B. Chromatographia, 1973; 6: 186

24 Pacakova V, Hoch K, Smolkova E. Chromatographia, 1973; 6: 323

25 Schomburg G, Gielmann. Anal Chem, 1973; 45: 1651

26 Sojak L, Hrivnak J, Majer P, et al. Anal Chem, 1973; 45: 294

27 Dielmann G, Schwengers D, Schomburg G. Chromalographia, 1974; 7: 218
28 Engewald W, Graefe J, Kiselev A V, et al. Chromatographia, 1974; 7: 229
29 Pacakova V, Ullmanova H, Chromatographia, 1974; 7: 75
30 Pascal J C, Heintz M, Druilhe A, et al. Chromatorgraphia, 1974; 7: 236
31 Rijks J A, Cramers C A. Chropatorgraphia, 1974; 7: 99
32 Sojak L, Barnoky L. Ropa Uhile, 1974; 16: 658
33 Sojak L, Hrivnak J, Ostrovsky I, et al. J Chromatogr, 1974; 91: 613
34 Svob V, Deu Siftar D. J Chromatogr, 1974; 91: 677
35 Grimmer G, Bohnke H. J Asso Off Anal Chem, 1975; 58: 725
36 Papazova D I, Pankova M C. J Chromatogr, 1975; 105: 411
37 Shlyakhov A F, Koreshkova R I, Telkova M S. J Chromatogr, 1975; 104: 337
38 Sultanor N T, Arustamova L G. J Chromatogr, 1975; 115: 553
39 Turdor E, Iovu M. Rev Roumaine Chim, 1975; 20: 818
40 Vaneertum R. J Chrom Sci, 1975; 13: 150
41 Engewald W, Epsch K, Wesch Th, et al. J Chromatogr, 1976; 119: 119
42 Engewald W, Wennrich L. Chromatographia, 1976: 9: 540
43 Firoo G, Gassiot M, Martin M, et al. J Chromatogr, 1976; 117: 105
44 Grimmer G, Bohnke H. Chromatographia, 1976; 9: 30
45 Hala L, Lacko R, Hegedusova K. Ropa Uhile, 1976: 18: 140
46 Lesko J, Holotik S, Krupcik J, et al. J Chromatogr, 1976; 119: 239
47 Rang S, Kuningas K, Orav A, et al. J Chromatogr, 1976; 119: 451
48 Riedo F, Fritz D, Tarjan G, et al. J Chromatogr, 1976; 126: 63
49 Ryba M. J Chromatogr, 1976; 123: 327
50 Sojak L, Rijks J A. J Chromatogr, 1976; 119: 505
51 Chretiem J R, Dubois J E. Anal Chem, 1977; 49: 747
52 Rang S, Kuningas K, Orav A, et al. Chromatographia, 1977, 10: 55
53 Rang S, Orav A, Kuningas K, et al. Chromatographia, 1977; 10: 115
54 Sojak L, Janak J, Rijks A. J Chromatogr, 1977; 135: 71
55 Pacakova V, Kozlik V. Chromatographia, 1978; 11: 266
56 Welsch Th, Engewald W, Berger. Chromatographia, 1978; 11: 5
57 Пабивач В М, Бурьяш, Мацак Н. Ж А Х, 1978; 33: 1416
58 Castello G, D'Amato G. J Chromatogr, 1979; 175: 27
59 Dimov N, Papazova D. Chromatographia, 1979; 12: 443
60 Engewald W, Wannrich L, Ritter E. J Chromatogr, 1979; 174: 315
61 Lukac S, Nguyen T Q. Chromatographia, 1979; 12: 231
62 McGregor T R. J Chrom Sci, 1979; 17: 314
63 Kumar P, Sarowha S, Gupta P. Analyst(London), 1979; 104: 788
64 Шляхов А Ф, Новикова Н В, Корешкова Р Н. Зав лаб, 1979; 45: 103
65 Albaige J, Guardino X. Chromatographia, 1980; 13: 755
66 Bartik T, Janosi A, Simon A. J Chromatogr, 1980; 197: 92
67 Bredael P, Rietvalde B. J Chromatogr, 1980; 192: 216
68 Dubois J E, Chretien J R, Sojak L, et al. J Chromatogr, 1980; 194: 121
69 Kuchhal R K, Kumar B, Kumar P, et al. HRC&CC, 1980; 3: 497
70 Mlejnek O. J Chromatogr, 1980; 191: 181
71 Sojak L, Krupcik J, Janak J. J Chromatogr, 1980; 191: 199
72 Sojak L, Krupcik J, Janak J. J Chromatogr, 1980; 195: 43
73 Sojak L, Ostrovsky I, Leclercq A, et al. J Chromatogr, 1980; 191: 187

74 Chien C F. Kopecni M M. Laub R J. HRC&CC. 1981; 4: 539
75 Gerasimenko V A, Kirilenko A V, Nabivach V M. J Chromatogr. 1981; 208: 9
76 Priboth I, Engewald W, Kuhn H, et al. J Chromatogr, 1981; 219: 113
77 Sellier F, Tersac G, Guiochon G. J Chromatogr, 1981; 219: 213
78 李浩春，戴朝政，徐方宝等. 科学通报，1981；26：1491
79 李浩春，关德淑，戴朝政. 中国科学院大连化学物理研究所资料，1973年；1981年
80 Anders G, Scheller M, Schuhler G et al. Chromatographia, 1982; 15: 43
81 Bredael P. HRC&CC, 1982; 5; 325
82 Freche P F, Grenier-Loustalot M F. J Chromatogr, 1982; 238; 327
83 Kumar B, Mathur H S, Kuchhal R K, et al. Analyst(London). 1982; 107: 761
84 Macak J, Nabivach V, Buryan P, et al. J Chromatogr, 1982; 234; 285
85 Patte F, Etcheto M, Laffort L. Anal Chem, 1982; 54; 2239
86 Sojak L, Kraus G, Farkas P, et al. J Chromatogr, 1982; 238; 51
87 Szafranek J, Kusmierz J, Czerwiec W. J Chromatogr, 1982; 245; 219
88 Терасименко В А, Набивач В М. Ж А Х, 1982; 37; 110
89 Chien C F, Furio D L, Kopecni M M, et al. HRC&CC, 1983; 6: 577
90 Chien C F, Furio D L, Kopecni M M, et al. HRC&CC, 1983; 6; 669
91 Lamparczyk H, Wilczynska D, Radecki A. Chromatographia, 1983; 17; 300
92 Lubeck A J, Sutton D L. HRC&CC, 1983; 6: 328
93 Toth T. J Chromatogr, 1983; 279; 157
94 Vernon F, Suratman J B. Chromatographia, 1983; 17: 600
95 Golovnya R V, Zhuravleva I L, Polanuer B M. J Chromatogr, 1984; 286; 79
96 Schroder H. HRC&CC, 1980; 3; 38, 95, 119, 362
97 Lubeck A L, Sutton D L. HRC&CC, 1984; 7; 542
98 Sojak L, Farkas P, Janak J, et al. J Chromatogr, 1984; 287; 271
99 Sojak L, Karl'ovicova E, Ostrovsky I, et al. J Chromatogr, 1984; 292; 241
100 Руденко Б А, Булычева Э Ю, Дылевская Л В. Ж А Х, 1984; 39; 344
101 Руденко Б А, Булычева Э Ю, Топунов В Н, И Др. Ж А Х, 1984; 39; 700
102 武杰，陆婉珍. 色谱，1984；1：11
103 叶伟君. 第一次全国石油化工色谱学术报告会文集，1984；609
104 Anders G, Ander K, Engewald W. Chromatographia, 1985; 20; 83
105 Kusmierz J, Malinski E, Czerwiec W, et al. J Chromatogr, 1985; 331; 219
106 Булычева Э Ю, Руденко Б А, Дылевская Л, И Др. Ж А Х, 1985; 40; 330
107 Widmer H. J Gas Chrom, 1968; 5; 506
108 Evans M B, Hanken J K, Toth T. J Chromatogr, 1986; 351; 155
109 Kumar B, Kuchhal R K, Kumar P, et al. J Chrom Sci, 1986; 24; 99
110 Polanuer B M, Zhuravleva I L, Golovnya R V. J Chromatogr, 1986; 365; 399
111 Bermejo J, Blanco C G, Diez M A, et al. HRC&CC, 1987; 10; 461
112 Engewald W, Billing U, Welsch T, et al. Chromatographia, 1987; 23; 590
113 Engewald W, Topalova I, Petsev N, et al. Chromatographia, 1987; 23; 561
114 Sojak L, Ruman J, Janak J. J Chromatogr, 1987; 391; 79
115 Heberger K. Chromatographia, 1988; 25; 725
116 Matisova E, Moravcova A, Krupcik J, et al. J Chromatogr, 1988; 454; 65
117 Matisova E, Rukriglova M, Krupcik J, et al. J Chromatogr, 1988; 455; 301
118 Papazova D, Milina R, Dimov N. Chromatographia, 1988; 25; 177
119 Schaefer R G, Holtemeier J. Chromatographia, 1988; 26; 311
120 李浩春，黄铃. 中国科学院大连化学物理研究所资料，1988年

121 Dimov N, Mekenyan Ov. J Chromatogr, 1989; 471: 227

122 Hanai T, Hong C. HRC&CC, 1989; 12: 327

123 Matisova E, Kovacicova E, Ha P T, et al. J Chromatogr, 1989; 475: 113

124 Boneva S. Chromatographia, 1990; 29: 322

125 Matisova E, Kuran P. Chromatographia, 1990; 30: 328

126 顾惠祥，阎宝石．气相色谱实用手册．第二版．北京：化学工业出版社，1990：207

127 Dutoit J C. J Chromatogr, 1991; 555: 191

128 Matisova E, Juranyiova E, Kuran P, et al. J Chromatogr, 1991; 552: 301

129 Sojak L, Farkas P, Ostrovsky I, et al. J Chromatogr, 1991: 557: 241

130 Reddy K S, Dutoit J C, Kovats E. J Chromatogr, 1992; 609: 229

131 Zhang M J, Li S D, Chen B J. Chromatogrphia, 1992; 33: 138

132 Zhang Hongwei, Hu Zhide. Chromatogrphia, 1992; 33: 575

133 Boneva S, Balbolov E. Chromatographia, 1993; 37: 227

134 Orav A, Kuningas K, Rang S. Chromatographia, 1993; 37: 411

135 Woloszyn T F, Jurs P C. Anal Chem, 1993; 65: 582

136 Hilal S H, Carreira L A, Karickhoff S W, et al. J Chromatogr A, 1994; 662: 269

137 Corbella R, Rodriguez M A, Sanchez M J, et al. Chromatographia, 1995; 40: 532

138 张铭金，唐仁生，沈士德等．色谱，1994; 13: 418

139 黄槭云，陈茂齐，杨世琰．色谱，1996; 14: 291

140 Daring C, Estel D, Fischer R. J Parkt Chem, 1974; 7: 218

141 Johansen G, Ettre L S. Chromatographia, 1982; 15: 625

（李浩春　修振佳）

第十四章　含氧化合物的保留指数

第一节　醇与酚的保留指数

表 14-1　C_1～C_9 醇与乙氧基醇保留指数（一）[30]

柱温：150℃

化合物 \ 固定液 I	角鲨烷	SE-30	OV-7	OV-17	OV-22	OV-25	QF-1	XE-60
甲醇	306	356	371	423	460	482	601	651
乙醇	370	427	164	512	533	580	639	709
正丙醇	473	530	578	630	655	688	746	850
正丁醇	584	636	691	741	765	804	853	970
正戊醇	694	742	802	896	870	907	947	1076
正己醇	797	852	910	951	978	1015	1053	1182
正庚醇	899	953	1010	1055	1084	1117	1154	1286
正辛醇	1001	1058	1115	1158	1188	1221	1256	1390
正壬醇	1097	1162	1217	1259	1292	1324	1351	1494
异丙醇	—	147	598	556	574	604	675	750
异丁醇		595	653	697	716	753	805	908
仲丁醇	533	570	627	674	689	723	785	857
叔丁醇	460	491	539	589	586	616	711	737
2-甲基戊醇	767	820	873	912	936	962	1017	1135
乙氧基甲醇	548	608	685	741	780	828	861	1003
乙氧基乙醇	632	694	764	815	849	904	932	1057
乙氧基丁醇	837	898	963	1014	1042	1095	1129	1249
乙氧基己醇	1033	1099	1165	1218	1244	1298	1334	1150

表 14-2　C_1～C_9 醇与乙氧基醇保留指数（二）[30]

柱温：150℃

化合物 \ 固定液 I	XF-1150	OV-105	OV-225	Silar 5CP	Silar 7CP	Silar 9CP	Silar 10C	OV-275
甲醇	1102	1157	692	765	978	1027	1094	1083
乙醇	1130	1168	753	834	989	1056	1117	1112
正丙醇	1193	1220	856	949	1104	1177	1234	1217
正丁醇	1288	1309	971	1072	1221	1295	1353	1335
正戊醇	1379	1396	1075	1185	1332	1409	1465	1411
正己醇	1472	1489	1181	1289	1438	1514	1570	1592
正庚醇	1571	1584	1284	1294	1541	1621	1672	1641
正辛醇	1668	1681	1384	1399	1643	1723	1777	1741
正壬醇	1771	1785	1487	1504	1744	1825	1880	1841
异丙醇	1128	1158	757	841	985	1049	1098	1083
异丁醇	1243	1265	916	1010	1156	1238	1282	1261
仲丁醇	1198	1223	869	960	1097	1164	1215	1194
叔丁醇	1120	1148	770	826	962	1015	1060	1055
2-甲基戊醇	1422	1437	1129	1236	1379	1453	1507	1483

续表

化合物 \ 固定液	XF 1150	OV-105	OV-225	Silar 5CP	Silar 7CP	Silar 9CP	Silar 10C	OV 275
乙氧基甲醇	1233	1215	1008	1140	1323	1420	1430	1375
乙氧基乙醇	1271	1281	1052	1193	1358	1447	1508	1484
乙氧基丁醇	1465	1471	1249	1384	1542	1624	1682	1658
乙氧基己醇	1673	1078	1460	1590	1741	1821	1876	1816

表 14-3 $C_1 \sim C_{10}$醇保留指数[16]

固定液	SE-30			OV-3			OV-7			OV-11			OV-17			OV-25		
化合物 \ 柱温/℃	100	120	140	100	120	140	100	120	140	100	120	140	100	120	140	100	120	140
甲醇	373	—	—	—		—	—		—	—		—	—	·		—	—	
乙醇	493		—	—		—	—		-	—	--	-	—	--		—	—	
丙醇	514		-	574	-		—			—	—		—	—			—	-
丁醇	650	643	643	672	667	667	702	696	702	725	726	·	748	748	744	702	790	788
戊醇	751	747	746	777	779	778	806	803	804	—		835	856	855	855	900	898	900
己醇	856	853	850	881	882	882	907	908	907	935	934	935	959	960	960	1003	1003	
庚醇	960	958	956	985	984	984	1010	1011	1010	1038	1036	1038	1062	1062	1062	1104	1104	1109
辛醇	1064	1058	1060	1087	1086	1086	1112	1112	1112	1139	1140	1139	1165	1165	—		·	1208
壬醇	1166	1160	1160	1189	1187	1187	—	1213	1214	—	—		1268	—	—	1303	1308	1315
癸醇	1264	1262	1264		—	—		-	—	—		—	—	·		—	—	1413
2-丙醇	477	—	—			—	-		—	—		—	—	--		—	—	·
2-丁醇	586	584	586	607	604	608	633	629	629	656	654		675	674	673	711	708	—
2-戊醇	689	685	685	711	706	708	736	733	736	756	758	—	777	777	774	811	809	806
2-己醇	787	786	783	811	808	806	835	832	—	—		858	878	877	875	914	911	910
2-庚醇	889	888	886	915	912	910	—	935	935	—	—	960	982	-		1006	1013	1015
2-壬醇	1091	1087	1089	1115	1114	1115	1137	1137	1137	1150	1159	1158	1183	1182			—	—
3-戊醇	689	685	685	708	704	705	733	729	729	756	750	753	777	777	774	808	804	—
3-己醇	785	783	781	807	809	806	830	827	831	853	851	—	878	876	873	904	901	900
3-庚醇	886	885	885	909	908	908	929	932	933	955	952		975	975	972	1008	1007	1009
4-庚醇	880	877	879	904	903	902	924	925	924	946	946	945	966	966	965	999	998	999
3-辛醇	982	976	978	1005	1004	1003	1024	1025	1025	—		—	—		-	—	-	
2-甲基-1-丙醇	612		—	641			654	650	648	—	—	680	680	704	699	740	739	740
2-甲基-1-丁醇	727	726	721			—	—		—	—		—	—		-	—	-	
2-甲基-1-戊醇	824	822	820	849	846	841	871	870	870	—		898	917	918	917	958	958	
2-甲基-2-丁醇	628		—	652	649	646	674	673	669	692	690	—	709	712	704	738	735	733
2-甲基-2-戊醇	720	716	720	718	742	741	767	763	764	—	-	782	801	804	796	827	826	826
3-甲基-2-己醇	822	817	818	848	842	841	867	863	859	884	882	877	904	902	898	930	918	926
2-甲基-2-庚醇	920	919	920	941	942	942	961	962	962	982	981	882	1001	1001		1026	1024	
2-甲基-3-己醇	858	852	854	876	877	880	897	898	898	920	919	—	939	940	938	969	970	968
3-甲基-1-丁醇	725	719	719	747	744	742	771	766	770	798	793	798	817	820	817	855	851	852
4-甲基-1-戊醇	827	823	821	819	848	845	876	871	872	902	899	988	923	922	920	960	958	964
2-乙基-1-丁醇	834	828	833	857	855	855		880	882	907	905	—	928		—	—	971	—
2-乙基-1-己醇	1019	1015	1017	1046	1043	1015	1067	1068	1069	1092	1092	1094	1116	[illegible]	—	1156	1156	1162
3-乙基-3-戊醇	853	847	-	876	878	879	898	899	903	920	922	—	939	946	946	974	974	979
2,2-二甲基-3-戊醇	814	815	817	834	837	838	855	857	858	874	876		890	892	894	919	920	923
2,2-二甲基-3-己醇	906	906	907	926	927	928	911	914	947	962	—	966	977	983	982	1004	1003	
1-戊烯-3-醇	675	670	664		·	—	715	715	711	—		—	—	·		807	807	

续表

固定液	SE-30			OV 3			OV-7			OV 11			OV 17			OV-25		
I 柱温/℃ 化合物	100	120	140	100	120	140	100	120	140	100	120	140	100	120	140	100	120	140
1 己烯-3 醇	771	770	767	791	791	988	818	816	816	842	843	847	864	864	862	901	891	901
1 庚烯 3 醇	872	871	869	894	894	894	918	918	919	944	944	944	967	967	967	1009	1009	-
1 辛烯-3 醇	972	972	968	995	995	996	1018	1019	1020	1044	1044	1043	1068	1068	1067	1109	1109	1112
2 丁烯-1 醇	664	657	653	684	682	680	715	713	713	—	—	747	769	769	768	819		820
3-己烯-1-醇	850	851	—	876	876	879	905	905	908	934	936	—	962	966	965	1016	1018	
3-庚烯-1-醇	941	941		969	969	968	996	997	997	1026	1026	1027		—		—		—
2 甲基-3 丁烯-2-醇	606	592	—	620	614	619	646	642	638	666	665	663	685	685	682	719	717	711
3 甲基 3-丁烯 1 醇	730	—	—	751	751	750	778	781	780	808	811	—	837	837	837	885	886	-
2-甲基 1-庚烯-3 醇	961	959	—	986	986	986	1009	1009	1010	1032	-	1036	—	1059	1058	1099	1099	1101
沉香醇	1090	1089	1090	-		—		—	-	—	—	—	—	—	-	—		—
右旋 8 萜烯 3 醇	1111	1146	1155	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	-	—	—	—	—
萜品烯 4-醇	1170	1173	1182	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
萜品醇	1181	1187	1195	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
香茅醇			1218	-		—		—	-	—	—	-	—	—	—	—	-	—
橙花醇	1221	1224	1229	-	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
牻牛儿醇	—	—	1246	—	—	—	—	—	—	—	·	—	—	—	—		—	
丁子香酚	1355	1235	1356	—	—		—		—		—		—	—	—	—	—	—

表 14-4 C_1～C_{10}醇（苯甲酰衍生物）保留指数[16]

固定液	SE-30			OV 3			OV-7			OV-11			OV-17			OV-25		
I 柱温/℃ 化合物	100	120	140	100	120	140	100	120	140	100	120	140	100	120	140	100	120	140
甲醇	1081	1087	1092	1129		1141	1169	1178	1183	1216	1223	1230	1262	1271	1283	1352	1360	1378
乙醇	1152	1157	1161	—	—	1212	1239	—	—	1286	1292	1298	1332	1339	1349	—	—	—
丙醇	1245	1254	1262	1295	—	1309	1336	1345	1352	1384	1389	1390	1427	1435	1444	1513	1523	1538
丁醇	1344	1352	1358	-		1404	1438	1442	1448	1483	1491	1497	1525	1533	1545	1614	1623	1635
戊醇	1440	1447	1456	—	—	1503	1535	1542	1548	1581		1594	1623	1631	1640	1710	1723	1734
己醇	1535	1549	1356	—	—	1604	—	1640	1648	—	1691	1695	1721	1730	1737	1810	1820	1830
庚醇	1638	1646	1654	—	1698	1702	—	1739	1747	—	1788	1793		1828	1837	—	1917	1929
辛醇	—	1745	1755	—	—	1802	—	·	—	·	—	1891	-	—	1938	—	·	—
壬醇	—	—	1856	—	—	—	—	—	—	—		—	-	—	2037		—	
癸醇		—	1952	—		2001		—	-	-	—	-	—	-	—	—	—	—
2 丙醇	1183	119.	1197	—	—	1242	—	—	—	—	-	—	1351	1355	1362	1436	1445	1457
2-丁醇	1281	1284	1292	—	—	1338	—		—	1409	1415	1420	1449	1456	1463	1534	1541	1554
2-戊醇	1368	1373	1379	1412	1419	1424	1453	1459	1465	1498	1506	1510	1536	1544	1550	1620	1628	1638
2 己醇	1461	1467	1472	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
2-庚醇	1556	-	1564	1598	1605	1611	1640	1646	1653	—	1690	—	—	1730	1763	1800	1811	1823
2 壬醇	—	1752	1759	—	1794	1798	—	1834	1842	—	-	—	—	—	—	-	—	
3 戊醇	1363	1370	1377	1409	—	1421	1447	1454	1462	1490	1498	1501	1534	1540	1546	—		—
3 己醇	1443	1447	1456	1491	—	1502	—	1536	1542	1574	1580	1586	1613	1619	1625	1699	1708	1718
3 庚醇	1536	—	1544	1580	-	1591	-	1626	1632	1664	1673	1676	1706	1709	1716	—	1798	1807
4-庚醇	1523	—	1536	—	1576	1582	—	1614	1622	—	—	1642	1693	1700	1706	1778	1785	1794
4-辛醇	1618		1621	—	1664	1670	—	1706	1711	—	1750	1753	-	—		—	1874	1881
2-甲基-1-丙醇	1305	1308	1314	1371	1378	1384	1392	1399	1405	1434	1449	1453	1471	1475	1488	1556	1564	1577
2-甲基 1-丁醇	1407	1414	1421	1456	1462	1467	1497	1504	1512	1539	1550	1554	—	1592	1599	1667	1676	1688
2-甲基-1-戊醇	1485	1500	1507	1542	1548	1555	—	1592	1600	—	1638	1642	1667	1675	1685	1752	1761	1771

续表

固定液	SE-30			OV-3			OV-7			OV-11			OV-17			OV-25		
化合物 \ *I* \ 柱温/℃	100	120	140	100	120	140	100	120	140	100	120	140	100	120	140	100	120	140
2-甲基-2-丁醇	1326	1332	1342	—	-		1408	1417	1422	—	—	—	1487	1496	1506	1571	1582	1594
2-甲基-2-戊醇	1400	1409	1422	1450	1457	1461	1487	1495	1499	1528	1539	1545	1566	1574	1582	—	—	—
2-甲基-2-己醇	1488	1496	1508	1538	1515	1551	1575	1582	1588	1616	1626	1631	1563	1660	1669	—	1742	1755
2-甲基-2-庚醇	1588	1597	1599	—	1635	1642	—	1673	—	—	1716	1723	—	—	—	—	—	—
2-甲基-3-己醇	1501	1505	1508	—	1548	1553	—	1588	1594	1624	1633	1638	—	—	—	—	—	—
3-甲基-1-丁醇	1409	1417	1419	—	1462	1468	1496	1502	1511	-	-	-	1582	1589	1599	1666	1676	1687
4-甲基-1-戊醇	1506	1514	1517	—	—	—	—	1602	-		-	-		-	-	-	-	—
2-乙基-1-丁醇	1500	1507	1514	—	1553	1560	1589	1596	1605		-	1653	1674	1685	1693	1761	1772	1785
2-乙基-1-己醇	—	1675	1685	—	—	1729	—	1763	1771	—	1810	1815	—	1848	1856	—	1934	1945
3-乙基-3-戊醇	—	1531	1526	—	—	—	—	—	—	1637	—	1659	—	1693	1702	—	—	—
2,2-二甲基-3-戊醇	1453	1465	1474	—	1510	1518	1541	1549	1558	1584	1594	1600	1621	1528	1637	1707	1717	1727
2,2-二甲基-3-己醇	1537	1538	1545	—	1538	1590	—	1622	1630	1656	1664	1670	1692	1698	1707	1784	1794	1802
1-戊烯-3-醇	1348	1356	1364	—	1407	1412	1443	1448	1456	1488	1498	1499	1531	1538	1545	1623	1634	1644
1-己烯-3-醇	1439	1443	1445	-	1490	1495	—	1533	1539	1573	1580	1586	—	—	—	—	-	-
1-庚烯-3-醇	1528	1531	1539	-	-		1620	1626	1632	1666	1673	1680	1709	1714	1722	—	1806	1818
1-辛烯-3-醇		-	1633	-	-	-	—	—	—	—	1766	1771	—	1808	1814	—	—	-
2-丁烯-1-醇	-	1373	1376	-	1419	1425	1462	1469	1473	1515	1523	1529	1564	1572	1577	1664	1674	1686
3-己烯-1-醇	-	1539	1546	-	1590	1593	—	1636	1645	—	—	1697	—	—	—	—	—	-
3-庚烯-1-醇	1619	1626	1630	—	1677	1684	—	1724	1732	—	—	1786	—	—	—	—	—	—
2-甲基-3-丁烯-2-醇	1317	1322	1326	—	1365	1370	—	1406	1412	1447	1454	1456	—	—	-	-	-	—
3-甲基-3-丁烯-1-醇	1414	1423	1426	—	1471	1477	-	1518	—	1562	1570	1577	—	—	—	—	—	-
2-甲基-1-庚烯-3-醇	—	1606	1611	—	—	—	—	-			1739	1746		-	1790	-	1877	1888
1,3-丙二醇	1551	1550	1554	-	1577	1584	-	1643	1651	—	—	—	—	—	—	—	—	-
1,4-丁二醇		1667	1669	1700	1700	1704	-	1769	1774	—	—	—	—	—	—	—	—	-
沉香醇	-		1765			1818	-	—	1859	—	—	—	—	—	—	—	—	-
异蒲勒醇	-	-	-	-	-	1862	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	-
1-萜品醇	—	-	1872		-	1937	-	—	2016	—	—	—	—	—	—	—	—	
萜品醇	—	—	1888	—	—	1945	-	-		-		-	-	-	—	—	—	-
香茅醇	—	—	1875	—	—	1938	—	—	—	—	—	—	—	—			-	—
橙花醇			1906			1959	-	—	2031	—	—	—	—	—	—	-	-	-
牻牛儿醇			1914			1977	-	—	—	—	—	—	—	—	—	-	-	-

表 14-5 C_1～C_{10}醇保留指数（一）[46]

固定液：SE-30

化合物 \ *I* \ 柱温/℃	80	100	120	140	160	180	200	220	240	260
甲醇	254	462	471	340	—	—			-	—
乙醇	381	496	513	369	—	—		-	-	—
正丙醇	546	565	575	518	—	—		-	-	—
正丁醇	660	649	649	628		-	—	—	—	—
正戊醇	768	754	748	682	—	—	-		-	—
正己醇	863	851	845	813	823	814	—	—	-	-
正庚醇	960	951	950	920	938	966	—	-	—	—
正辛醇	1057	1050	1049	1033	1037	1042	—	—	-	
正壬醇	1154	1149	1147	1143	1140	1140	1167	—	-	
正癸醇	1252	1249	1247	1247	1244	1247	1241	1256	1246	—

续表

化合物 \ 柱温/℃	80	100	120	140	160	180	200	220	240	260
正十一醇		1319	1347	1348	1349	1350	1348	1339	1348	
正十二醇			1448	1451	1451	1450	1449	1442	1458	—
正十四醇	—	—	1646	1652	1653	1657	1659	1653	1661	1670
正十六醇	—	—	—	1852	1856	1862	1862	1861	1865	1866
正十八醇		—	—	—	2058	2065	2063	2061	2069	2067

表 14-6 C_1~C_{18}醇保留指数（二）[46]

固定液：OV-351

化合物 \ 柱温/℃	80	100	120	140	160	180	200	220
甲醇	891	917	978	—	—	—	—	—
乙醇	924	952	1015	—	—	—	—	—
正丙醇	1024	1037	1031	—				—
正丁醇	1131	1148	1121	1153	—	—	—	—
正戊醇	1241	1256	1238	1263	1288	1210	—	—
正己醇	1348	1357	1332	1362	1378	1358	1112	—
正庚醇	1452	1453	1427	1459	1467	1444	1461	
正辛醇	1556	1551	1528	1557	1555	1550	1556	
正壬醇	1663	1649	1627	1558	1659	1652	1661	1680
正癸醇		1716	1726	1760	1759	1753	1764	1783
正十一醇	—	1845	1826	1861	1856	1853	1861	1886
正十二醇		1942	1924	1962	1957	1960	1960	1979
正十四醇	—	—	—	2164	2161	2165	2165	2177
正十六醇				2365	2362	2367	2370	2375
正十八醇					2563	2570	2574	2573

表 14-7 C_3~C_6醇保留指数[47]

固定液	SE-30						OV-351				
化合物 \ 柱温/℃	60	80	100	120	140	160	60	80	100	120	140
2-丙醇	491	453	508		—	—	949	957	981	—	—
2-甲基-2-丙醇	531	500	548	—	—	—	930	912	981	—	
2-丁醇	605	577	615	622	—	—	1038	1036	1018	1114	1206
2-甲基-2-丁醇	644	628	652	662	612		1028	1026	1048	1114	1206
2-甲基-1-丙醇	620	600	629	641	620		1100	1094	1108	1153	1241
3-甲基-2-丁醇	683	668	683	690	690		1100	1094	1108	1153	1241
2-戊醇	697	683	692	701	704		1129	1121	1130	1172	1254
3-甲基-1-丁醇	733	721	723	727	738	—	1212	1203	1208	1238	1315
2-丙烯-1-醇		516	576	558		—	—	1128	1130	1167	1245
4-戊烯-2-醇	—	679	673	675	687	734	—	1154	1159	1184	1263
3-丁烯-1-醇		610	610	641	620	663	—	1185	1187	1209	1283
1-戊烯-3-醇		757	739	730	764	794	—	1308	1305	1305	1370
2-丙炔-1-醇	—	552	576	559	569	602	—	1352	1343	1334	1395
反-3-己烯-1-醇	—	853	831	824	853	873		1368	1366	1361	1423
顺-3-己烯-1-醇		859	836	829	855	873	—	1387	1385	1382	1442

表 14-8 C_4～C_7醇保留指数[66]

固定液：$C_{78}H_{158}$　柱温：130℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
1-丁醇	594.8	2-戊醇	643.8	2-甲基-2-戊醇	690.9
1-戊醇	698.8	2-己醇	744.7	2-甲基-2-己醇	786.1
1-己醇	800.9	2-庚醇	845.0	环己醇	852.9
1-庚醇	902.2	2-甲基-2-丙醇	471.0	苯甲醇	980.0
2-丁醇	545.4	2-甲基-2-丁醇	597.9	2-苯基乙醇	1058.2

表 14-9 C_4～C_8醇保留指数[66]

固定液：$C_{78}H_{158}$—$C_{57}H_{115}OH$　柱温：130℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
1-丁醇	596.7	2-丁醇	549.7	2-甲基-2-丁醇	600.2
1-戊醇	700.0	2-戊醇	647.8	2-甲基-2-戊醇	691.9
1-己醇	801.6	2-己醇	747.3	2-甲基-2-己醇	787.0
1-庚醇	903.2	2-庚醇	837.2	2-甲基-2-庚醇	884.7
1-辛醇	1004.1	2-辛醇	948.8	环己醇	855.3

表 14-10 C_5～C_{15}醇保留指数[65]

固定液：甲基乙烯基硅烷

化合物 \ 柱温/℃ I	150	180	220	化合物 \ 柱温/℃ I	150	180	220	化合物 \ 柱温/℃ I	150	180	220
n-C_5醇	726.7	-	—	n-C_{17}醇	—	1965.6	—	i^0-C_{14}醇	—	1625.7	—
n-C_6醇	836.8	---		n-C_{18}醇		2063.7	2083.0	i^0-C_{15}醇	--	1726.1	—
n-C_7醇	952.8	957.6	—	n-C_{20}醇	—	-	2274.5	i^*-C_7醇	930.0		-
n-C_8醇	1055.5	1051.6		i^0-C_6醇	812.1	—		i^*-C_8醇	1028.2	—	—
n-C_9醇	1157.5	1156.8	-	i^0-C_7醇	918.7	-		i^*-C_9醇	1129.4	1131.9	—
n-C_{10}醇	1257.9	1259.5		i^0-C_8醇	1020.1	1014.3		i^*-C_{10}醇	1229.5	1231.6	—
n-C_{11}醇	1357.4	1361.7	—	i^0-C_9醇	1120.2	1120.7	—	i^*-C_{11}醇	1329.7	1332.0	—
n-C_{12}醇	1157.9	1464.2	—	i^0-C_{10}醇	1221.0	1220.1	—	i^*-C_{12}醇	—	1432.6	-
n-C_{14}醇	—	1665.5	1661.9	i^0-C_{11}醇	1322.2	1323.4	—	i^*-C_{13}醇		1533.0	-
n-C_{15}醇	—	1765.5	—	i^0-C_{12}醇	1423.4	1424.0	—	i^*-C_{14}醇	—	1633.9	—
n-C_{16}醇		1865.6	1873.1	i^0-C_{13}醇		1525.1		i^*-C_{15}醇	—	1734.4	—

① i^0醇为 $R-C(OH)(CH_2CH_3)-C(CH_3)-CH_3$；$i^*$-醇为 $R-C(OH)(C_2H_5)-C_3H_7$。

表 14-11 C_6醇保留指数（一）[67]

固定液：PEG-400　柱温：100℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
2,3-二甲基-2-丁醇	1187	2-甲基-3-戊醇	1240	3-己醇	1285
2-甲基-2-戊醇	1191	4-甲基-2-戊醇	1260	2-己醇	1318
3-甲基-3-戊醇	12[illegible]0				

表 14-12 C_6 醇保留指数（ ）[57]

固定液	OV-110			Carbowax 20M		
柱温/℃	80	90	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	80	90	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
化合物 \ 保留指数	I			I		
2,3-二甲基-2-丁醇	715.2	716.3	1.1	1100.0	1101.1	1.1
3,3-二甲基-2-丁醇	722.3	723.4	1.1	1112.1	1113.6	1.5
2-甲基-2-戊醇	722.3	723.4	1.1	1112.1	1113.6	1.5
3-甲基-3-戊醇	733.4	733.9	0.5	1015.4	1016.2	0.8
2-甲基-3-戊醇	748.1	749.5	1.4	1074.0	1076.0	2.0
4-甲基-2-戊醇	774.4	775.5	1.1	1203.2	1204.1	0.9
3-甲基-2-戊醇	780.0	780.8	0.8	1212.3	1213.7	1.4
3-己醇	782.6	783.8	1.2	1206.2	1207.2	1.0
2,2-二甲基-1-丁醇	789.2	790.3	1.1	1230.0	1230.9	0.9
2-己醇	803.1	804.4	1.3	1253.9	1254.5	0.6
3,3-二甲基-1-丁醇	815.5	816.7	1.2	1275.8	1276.2	0.4
2,3-二甲基-1-丁醇	823.9	825.1	1.2	1290.0	1290.7	0.7
2-甲基-1-戊醇	836.2	837.5	1.3	1311.5	1320.2	0.7
4-甲基-1-戊醇	851.0	852.6	1.6	1338.0	1338.2	0.2
3-甲基-1-戊醇	854.4	855.2	1.9	1343.8	1343.5	−0.2
1-己醇	878.0	879.5	1.5	1384.3	1384.1	0.2

表 14-13 $C_7 \sim C_{23}$醇保留指数[43]

柱温：240 ℃

化合物 \ I \ 固定液	DB-1	CP-Sil 5	DB WAX	CP-WAX 52	化合物 \ I \ 固定液	DB-1	CP-Sil 5	DB-WAX	CP-WAX 52
1-庚醇	—	981.0	1468.0	1404.7	1-十六醇	1873.6	1877.2	2481.6	2341.5
1-辛醇	1050.7	1081.5	1554.4	1517.3	1-十七醇	1973.6	1978.9	2585.2	2444.8
1-癸醇	1261.9	1280.4	1768.6	1724.2	1-十八醇	2074.2	2074.6	2686.7	2549.1
1-十二醇	1471.5	1477.1	2073.7	1934.7	1-十九醇	2275.6	2176.4	2789.4	2652.5
1-十三醇	1565.4	1576.8	2175.2	2033.3	1-二十醇	2276.2	2275.4	2994.6	2755.3
1-十四醇	1669.1	1676.3	2277.6	2137.2	1-二十二醇	2476.2	2475.2	3097.3	2962.8
1-十五醇	1772.1	1776.0	2379.3	2240.7	1-二十三醇	—	2576.6	—	—

表 14-14 $C_9 \sim C_{14}$醇保留指数[15]

固定液	聚乙二醇-20M		聚乙二醇-1500		OV-101	
柱温/℃	150		155		140	
化合物 \ 保留指数	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
5-壬醇	1473.6	−3.1	1380.8	4.9	1186.1	−0.9
4-壬醇	1473.6	−3.1	1390.1	5.5	1189.2	0.9
3-壬醇	1488.7	−3.2	1412.0	6.1	1203.9	−0.7
2-壬醇	1515.8	−4.6	1438.1	6.7	1219.0	0.6
5-癸醇	1573.8	−2.4	1473.8	5.7	1280.0	−0.6
4-癸醇	1573.8	−2.4	1483.7	6.7	1286.2	0.6
3-癸醇	1590.3	−3.0	1506.5	7.6	1302.5	−0.7
2-癸醇	1616.7	−3.3	1533.5	7.6	1319.6	−0.7
6-十一醇	1674.5	−1.1	1560.9	5.9	1373.8	0.6
5-十一醇	1674.5	−1.1	1566.1	6.0	1376.2	−0.7

续表

固定液	聚乙二醇-20M		聚乙二醇-1500		OV-101	
柱温/℃	150		155		140	
保留指数 / 化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
4-十一醇	1674.5	-1.1	1577.1	7.0	1283.0	-0.5
3-十一醇	1692.6	-2.8	1600.7	8.7	1400.0	-0.5
2-十一醇	1720.0	-4.2	1629.5	8.9	1417.3	-0.6
6-十二醇	1774.7	-3.3	1653.6	7.3	1471.3	-1.0
5-十二醇	1774.7	-3.3	1659.8	7.6	1474.5	-0.8
4-十二醇	1777.6	-2.4	1671.8	8.3	1482.4	-0.6
3-十二醇	1795.2	-3.6	1697.6	9.1	1499.9	-0.5
2-十二醇	1821.4	-3.2	1726.7	9.7	1517.7	-0.5
7-十三醇	1876.6	-4.3	1745.8	8.2	1568.3	-0.9
6-十三醇	1876.6	-4.3	1747.2	8.7	1569.5	-1.4
5-十三醇	1876.6	-4.3	1755.0	9.1	1573.7	-1.2
4-十三醇	1879.8	-2.4	1768.4	9.6	1582.0	-1.2
3-十三醇	1897.3	-3.8	1794.1	9.5	1599.4	-0.8
2-十三醇	1923.4	-3.0	1823.1	10.3	1617.7	-1.1
7-十四醇	1976.8	-2.2	1841.2	7.1	1665.7	-1.0
6-十四醇	1976.8	-2.2	1843.3	7.7	1667.8	-1.2
5-十四醇	1976.8	-2.2	1851.0	8.3	1672.2	-1.2
4-十四醇	1982.0	-2.1	1864.5	8.8	1680.8	-1.1
3-十四醇	1997.8	-2.3	1890.2	10.1	1699.0	-1.0
2-十四醇	2026.2	-3.6	1919.3	10.8	1717.9	-1.2

表 14-15　醇类及其衍生物保留指数（一）[8]

柱温：100℃

固定液	DEGS	PEG-20M	SE-30	DEGS	PEG-20M	SE-30	DEGS	PEG-20M	SE-30	DEGS	PEG-20M	SE-30
I 衍生物 / 化合物	醇类			甲硅烷基醚			乙酸酯			三氟乙酸酯		
甲醇	980	892	<400	-	—	—	970	836	505	—	-	
乙醇	1027	922	480	-	—	—	990	898	602	—	-	—
2-丙醇	985	912	490	—	—	—	1000	912	610	—	—	
丙醇	1120	1030	562	—	—	-	1084	986	695	—	—	-
2-甲基-2-丙醇	962	882	527	—	-	—	975	845	595	—	—	—
2-丁醇	1115	1014	590	—	—	—	1112	990	740	—	—	—
2-甲基-1-丙醇	1180	1083	612	—	—	—	1133	1025	758	—	—	—
丁醇	1212	1138	655	—	—	—	1177	1085	805	977	814	652
2-甲基-2-丁醇	1074	1002	622	—	—	—	1150	917	680	—	—	—
3-甲基-2-丁醇	1170	1090	672	—	—	—	1095	1067	812	—	—	—
3-戊醇	1182	1097	685	—	—	—	1165	1077	835	—	—	—
2-戊醇	1195	1112	682	—	—	—	1170	1080	840	—	-	—
2-甲基-1-丁醇	1270	1202	724	—	-	—	1220	1132	865	—	-	-
3-甲基-1-丁醇	1270	1205	726	—	—	—	1222	1135	867	1068	877	755
戊醇	1307	1245	752	948	910	887	1263	1182	899	1160	980	842
己醇	1400	1342	855	1050	1007	982	1350	1299	1002	1255	1070	945
庚醇	1490	1450	945	1152	1104	1078	1443	1385	1092	1348	1185	1046
辛醇	—	—	—	1248	1200	1177	—	—	—	—	—	—
壬醇	—	—	-	1355	1298	1270	—	—	—	—	—	—
癸醇	—	—	-	1448	1395	1372	-	—	—	—	—	—

表 14-16 醇类及其衍生物保留指数（二）[8]

柱温：100℃

固定液	DEGS	PEG-20M	SE-30	DEGS	PEG-20M	SE 30	DEGS	PEG-20M	SE-30	DEGS	PEG 20M	SE 30
I 衍生物 / 化合物	丙酸酯			五氟丙酸酯			丁酸酯			六氟丁酸酯		
甲醇	1010	916	612			--	1085	997	704	—	—	---
乙醇	1063	970	695	—	—	—	1127	1045	781			
2-丙醇	1040	970	742	—	—	—	1100	1050	822	—	-	
丙醇	1150	1050	792	—	—	—	1215	1135	882	-		
2-甲基-2-丙醇	1030	998	691	—	—	—	1082	1048	799			
2-丁醇	1145	1065	847				1215	1140	925		-	--
2-甲基-1-丙醇	1155	1090	852	-			1205	1170	939			--
丁醇	1232	1151	896	882	760	687	1295	1230	985	882	730	737
2-甲基-2-丁醇	1175	1026	754	—	—	—	1190	1080	815	—	—	
3-甲基-2-丁醇	1175	1130	908				1237	1210	994			
3-戊醇	1226	1142	930	—	—	—	1280	1220	1014	—	—	-
2-戊醇	1233	1152	927	—	—	--	1280	1225	1010	—	—	--
2-甲基-1-丁醇	1242	1197	952				1305	1285	1044			
3-甲基-1-丁醇	1245	1200	954	952	820	784	1307	1289	1046	965	835	835
戊醇	1316	1257	990	1060	919	882	1375	1326	1082	1062	923	920
己醇	1405	1354	1090	1156	1025	974	1460	1430	1177	1155	1025	1017
庚醇	1485	1455	1192	1255	1120	1071	1545	1526	1270	1255	1126	1114
辛醇	—	—	—	--						--	--	-
壬醇	—	—	—	—	—	—	—	—	—			
癸醇	—	—	—	—	—	—	—	-				

表 14-17 醇类及其衍生物保留指数（三）[8]

柱温：140℃

固定液	DEGS	PEG-20M	SE 30	DEGS	PEG-20M	SE 30	DEGS	PEG 20M	SE-30	DEGS	PEG 20M	SE-30
I 衍生物 / 化合物	醇类			甲硅烷基醚			乙酸酯			三氟乙酸酯		
己醇	1455	1350	856	--	—	—	1380	1301	999	1157	960	825
庚醇	1542	1452	955	1152	1087	1078	1490	1385	1095	1258	1073	940
辛醇	1648	1555	1061	1242	1185	1177	1597	1487	1198	1347	1172	1040
壬醇	1744	1655	1160	1355	1275	1265	1689	1582	1290	1449	1270	1137
2-辛醇	1530	1411	990	1182	1152	1111	1487	1398	1127	1150	1075	967
癸醇	--	--	-	1442	1365	1360	—	—	—	1543	1367	1232
十二醇	—	—	—	1610	1568	1564	—	—	—	1736	1555	1421
十四醇	-		-	1797	1750	1754	—	—	—	—	—	—
十六醇	—	—	—	1978	1942	1938	—	--		2107①	1929①	1805①
十八醇				2158	2135	2128	—	—	—	2287①	2121	1901①

① 柱温为160℃。

表 14-18　醇类及其衍生物保留指数（四）[8]

柱温：180℃

固定液	DEGS	PEG-20M	SE-30	DEGS	PEG-20M	SE-30	DEGS	PEG-20M	SE-30	DEGS	PEG-20M	SE-30
I 衍生物 / 化合物	醇类			甲硅烷基醚			乙酸酯			三氟乙酸酯		
辛醇	1565	1552	1057	—	—	—	1648	1552	1286	-	1622	1370
壬醇	1758	1655	1160	1720	1587	1295	1750	1065	1385	1830	1724	1470
癸醇	1863	1740	1263	1815	1674	1385	1864	1748	1476	1927	1822	1568
十二醇	2040	1925	1471	1996	1868	1587	2044	1995	1676	2110	2023	1768
十四醇	2228	2112	1669	2172	2062	1790	2222	2178	1873	2288	2212	1964
十六醇	2417	2297	1864	2356	2254	1948	2404	2370	2068	2470	2400	2154
十八醇	2596	2488	2060	2540	2448	2178	2598	2560	2262	2662	2595	2352

表 14-19　醇类衍生物保留指数（一）[8]

柱温：140℃

固定液	DEGS	PEG-20M	SE-30	DEGS	PEG-20M	SE-30	DEGS	PEG-20M	SE-30	DEGS	PEG-20M	SE-30
I 衍生物 / 化合物	丙酸酯			五氟丙酸酯			丁酸酯			六氟丁酸酯		
己醇	1415	1355	1085	—	907	859	1485	1426	1177	—	907	896
庚醇	1535	1455	1183	1107	1016	962	1580	1526	1273	1107	1016	1010
辛醇	1648	1555	1284	1216	1114	1062	1668	1624	1377	1215	1111	1105
壬醇	1730	1650	1385	1328	1215	1160	1762	1728	1470	1325	1215	1201
2-辛醇	1590	1430	1231	1108	1001	987	1643	1507	1298	1110	1101	1032
癸醇	-	--	-	1431	1311	1256	-	-	-	1430	1311	1298
十二醇	--	—	—	1630	1505	1481	—	—	—	1632	1505	1480
十四醇	--	—	—	1832	1701	1668	—	--	—	1836	1701	1668
十六醇		--	-	2031[1]	1894[1]	1859[1]	—	—	—	2034[1]	1891[1]	1862[1]
十八醇		-	-	2239[1]	2097[1]	2054[1]	—	—	—	2241	2095	2063

①柱温为160℃。

表 14-20　醇类衍生物保留指数① （二）[27]

固定液：SE-30

I 柱温/℃ / 化合物	132	142	180	I 柱温/℃ / 化合物	132	142	180
甲醇	1000	-	-	异丁醇	--	1270	-
乙醇	1065	--	--	叔丁醇	—	1185	—
1-丙醇	--	1180	—	苯甲醇	--	—	1520
2-丙醇	-	1140	—	环己醇	--	—	1355
1-丁醇	—	1230	--	3-辛醇	--	--	1535
2-丁醇	--	1295	--	3-壬醇	--	-	1640

①醇类 Flophemesylamine 衍生物。

表 14-21 异构醇衍生物保留指数[10]

固定液：SE-30

柱温/℃	190	143	柱温/℃	190	143
化合物	锥满酸酯	菊酸酯	化合物	锥满酸酯	菊酸酯
(+)-2-辛醇	2280	1725	(+)-冰片	2475	1900
(−)-2-辛醇	2300	1740	(−)-冰片	2475	1905
(+)-薄荷醇	2435	1880	(+)-异冰片	2475	1895
(−)-薄荷醇	2450	1895	(−)-异冰片	2475	1905
(+)-异薄荷醇	2430	1880	(+)-葑醇	2410	1825
(−)-异薄荷醇	2435	1895	(−)-葑醇	2405	1810
(+)-新薄荷醇	2395	1835	(+)-泛醇内酯	2405	1820
(−)-新薄荷醇	2395	1850	(−)-泛醇内酯	2390	1810

表 14-22 McReynolds 常数化合物和醇[25]

固定液：OV-1　　柱温：90℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
正戊烷	—	正辛烷	—	仲丁醇	593
正己烷	—	碘丁烷	813	异丁醇	618
2-戊酮	672	2-辛炔	865	正丁醇	656
1,4-二氧噁烷	697	正壬烷	—	正庚烷	—
硝基丙烷	718	甲醇	409	2-甲基-2-戊醇	724
吡啶	742	叔丁醇	507	正辛烷	—

表 14-23 芳香醇保留指数[54]

固定液	SE-30				OV-351					
I 柱温/℃ 化合物	60	80	100	120	100	120	140	160	180	200
苯甲醇	1009	1009	1009	1014	1834	1846	1857	1870	1875	1887
(±)-1-苯乙醇	1035	1037	1038	1042	1780	1785	1796	1812	1813	1817
2-苯乙醇	1084	1086	1092	1099	1865	1874	1892	1904	1906	1914

表 14-24 二醇保留指数[70]

柱温：180℃

I 固定液 化合物	聚缩水甘油	PEG 20M	I 固定液 化合物	聚缩水甘油	PEG 20M
2,3-丁二醇	2142.6	1544.5	1,3-丙二醇	—	1789.5
1,2-丙二醇	2398.0	1595.9	1,4-丁二醇	—	1925.7
1,3-丁二醇	2600.0	1748.1			

表 14-25 多元醇及甲基苷类（TFA 衍生物）保留指数[7]

固　定　液	OV-17		FS-1265		SE-30	
I 柱温/℃ 化合物	200	150	100	150	100	150
1,2-乙二醇	1090	1115	801	756	740	706
丙三醇	1374	1456	954	856	913	837
内消旋-1,2,3,4-丁四醇	1550	670	1002	870	1006	923
消旋苏糖醇	1554	1672	1010	872	1000	918

续表

固定液	OV-17		FS-1265		SE 30	
I 柱温/℃ 化合物	200	150	100	150	100	150
右旋核糖醇	1678	1824	1047	868	1092	990
右旋木糖醇	1715	—	1080	905	1125	1017
右旋半乳糖醇	1848	1994	1130	935	1195	1081
1,3-丁二醇	1246	1286	907	865	860	823
1,4-丁二醇	1350	1400	1014	964	942	906
1,8-辛二醇	1751	1807	1398	1326	1336	1292
季戊四醇	1880	1967	1123	1000	1115	1044
环戊醇	1024	1026	844	830	785	770
环己醇	1131	1128	942	935	881	876
环十二醇	1745	1750	1560	1535	1474	1468
反-1,2-环己二醇	1424	1468	1112	1086	1049	1030
顺-1,3-环己二醇	1477	1531	1122	1079	1053	1030
反-1,3-环己二醇	1540	1586	1187	1147	1097	1078
顺-1,4-环己二醇	1474	1530	1132	1086	1042	1026
反-1,4-环己二醇	1518	1570	1175	1127	1097	1058
反-1,2-环己二醇	1527	1576	1233	1182	1140	1121
α-右旋甲基阿糖吡喃苷	1626	1722	1256	1160	1192	1128
β-右旋甲基阿糖吡喃苷	1596	1683	1216	1120	1182	1127
β-右旋甲基核糖吡喃苷	1736	1819	1343	1248	1260	1213
α-右旋甲基木糖吡喃苷	1590	1672	1234	1130	1169	1136
α-右旋甲基葡糖吡喃苷	1986	2029	1321	1200	1340	1266
β-右旋甲基葡糖吡喃苷	2026	2073	1371	1220	1360	1274
α-右旋甲基甘露糖吡喃苷	1927	2000	1320	1206	1350	1265
α-左旋甲基鼠李糖吡喃苷	1515	1600	1126	1042	1163	1109

表 14-26 酚类保留指数（一）[28]

固定液	OV-1	固定液	OV-1	固定液	OV-1
I 柱温/℃ 化合物	180	I 柱温/℃ 化合物	180	I 柱温/℃ 化合物	180
苯酚	905.1	5-甲基-2-异丙基苯酚	1228.3	乙酰基香草酮	1502.8
邻甲酚	978.1	对苯二酚	1327.0	4-乙基-2,6-二甲氧基酚	1557.4
间甲酚	985.1	丁子香酚	1338.9	4-丙基-2,6-二甲氧基酚	1621.2
对甲酚	991.9	4-丙基邻甲氧基苯酚	1344.8	丁香醛	1739.1
邻甲氧基苯酚	1047.1	2,6-二甲氧基苯酚	1392.1	乙酰基丁香酮	1798.9
3,5-二甲基苯酚	1124.1	间苯二酚	1378.7	丁香酸	1934.4
2,3-二甲基苯酚	1132.5	3-叔丁基-4-羟基甲氧基苯	1458.6		
2,4,6-三甲基苯酚	1155.9	4-甲基-2,6-二甲氧基酚	1498.2		

表 14-27 酚类保留指数（二）[62]

固定相	PS-225	OV-1701	石墨化炭黑	固定相	PS-225	OV-1701	石墨化炭黑
I 柱温/℃ 化合物	150	150	220	I 柱温/℃ 化合物	150	150	220
苯酚	952	1221	713	3-乙酚	1143	1407	899
2-甲酚	1030	1274	824	4-乙酚	1142	1401	920
3-甲酚	1050	1312	832	2-正丙酚	1198	1430	964
4-甲酚	1049	1310	839	3-正丙酚	1236	1493	990
2-乙酚	1115	1351	888	4-正丙酚	1235	1496	997

续表

固定相 / 化合物 (I)	PS 225	OV 1701	石墨化炭黑	固定相 / 化合物 (I)	PS 225	OV 1701	石墨化炭黑
柱温/℃	150	150	220	柱温/℃	150	150	220
2-异丙酚	1175	1408	911	4-叔丁酚	1271	1530	990[1]
3-异丙酚	1207	1463	942	2,3-二甲酚	1159	1401	977[2]
4-异丙酚	1204	1462	949	2,4-二甲酚	1128	1359	977[2]
2-正丁酚	1299	1530	1058	2,5-二甲酚	1130	1360	976[2]
4-正丁酚	1335	1596	1094	2,6-二甲酚	1096	1299	957[2]
2-仲丁酚	—	—	960	3,4-二甲酚	1172	1432	991[2]
4-仲丁酚	1293	1547	1002	3,5-二甲酚	1146	1399	978[2]
2-叔丁酚	1250	1477	942[1]				

1 柱温为 210 ℃。

2 柱温为 150 ℃。

表 14-28 酚类保留指数（三）[192]

固定液：八环聚苯乙醚

化合物 (I) 柱温/℃	140	160	化合物 (I) 柱温/℃	140	160
苯酚	1272	1281	2,4,6-三甲基苯酚	1508	1516
2-甲基苯酚	1346	1354	3,4,5-三甲基苯酚	1656	1667
3-甲基苯酚	1378	1386	2-正丁基苯酚	1594	1600
4-甲基苯酚	1377	1385	3-正丁基苯酚	1659	1668
2-乙基苯酚	1423	1430	4-正丁基苯酚	1654	1661
3-乙基苯酚	1475	1483	2-异丁基苯酚	1524	1532
4-乙基苯酚	1465	1473	4-异丁基苯酚	1594	1599
2,3-二甲基苯酚	1486	1495	2-仲丁基苯酚	1542	1550
2,4-二甲基苯酚	1445	1456	4-仲丁基苯酚	1604	1612
2,5-二甲基苯酚	1443	1453	2-叔丁基苯酚	1532	1538
2,6-二甲基苯酚	1403	1416	3-叔丁基苯酚	1592	1598
3,4-二甲基苯酚	1519	1530	4-叔丁基苯酚	1584	1593
3,5-二甲基苯酚	1479	1489	2-甲基-4-正丙基苯酚	1615	1623
2-正丙基苯酚	1496	1502	2-甲基-6-正丙基苯酚	1545	1553
3-正丙基苯酚	1558	1565	3-甲基-6-正丙基苯酚	1592	1602
4-正丙基苯酚	1555	1563	4-甲基-2-正丙基苯酚	1584	1593
2-异丙基苯酚	1470	1478	2-甲基-6-异丙基苯酚	1519	1529
3-异丙基苯酚	1523	1531	3-甲基-6-异丙基苯酚	1567	1575
4-异丙基苯酚	1519	1527	2,4-二乙基苯酚	1595	1602
2-乙基-4-甲基苯酚	1513	1523	2,5-二乙基苯酚	1613	1624
2-乙基-5-甲基苯酚	1519	1529	2,6-二乙基苯酚	1537	1549
2-乙基-6-甲基苯酚	1472	1485	3,4-二乙基苯酚	1671	1682
3-乙基-5-甲基苯酚	1571	1581	2,3,4,5-四甲基苯酚	—	1782
3-乙基-6-甲基苯酚	1518	1528	2,3,4,6-四甲基苯酚	1674	1690
4-乙基-2-甲基苯酚	1533	1539	2,3,5,6-四甲基苯酚	1667	1683
4-乙基-3-甲基苯酚	1596	1608	2-乙基-4,5-二甲基苯酚	1648	1656
2,3,4-三甲基苯酚	1629	1638	2-正戊基苯酚	—	1700
2,3,5-三甲基苯酚	1583	1593	4-正戊基苯酚		1765
2,3,6-三甲基苯酚	1542	1551	4-叔戊基苯酚	1691	1703
2,4,5-三甲基苯酚	1579	1593	2-乙基-5-正丙基苯酚	1692	1706

续表

化合物 \ 柱温/°C	140	160
2-叔丁基-4-甲基苯酚	1603	1608
2-叔丁基-5-甲基苯酚	1624	1633
2-叔丁基-6-甲基苯酚	1564	1578
4-叔丁基-2-甲基苯酚	1591	1601
4-叔丁基-3-甲基苯酚		1764
五甲基苯酚	—	1874
2-正己基苯酚	—	1800
4-正己基苯酚	—	1871
2-正丁基-6-乙基苯酚		1807
2,6-二异丙基苯酚	1608	1616
2-环己基苯酚	—	1926
4-环己基苯酚	—	1996
2-苯基苯酚	-	1912
3-苯基苯酚	—	2165
4-苯基苯酚		2177
2-苄基苯酚		2100
4-苄基苯酚		2200
4-异辛基苯酚		1891
2-叔辛基苯酚	-	1804
4-叔辛基苯酚	—	1892
2,4-二叔丁基苯酚	1722	1728
2,5-二叔丁基苯酚	—	1841
2,6-二叔丁基苯酚	1643	1651
3,5-二叔丁基苯酚	—	1800
2-苯基-4-甲基苯酚	—	2189
4-甲基-2-叔辛基苯酚	—	1842
2-甲基-4-叔辛基苯酚	—	1904
2-甲基-6-叔辛基苯酚	—	1804
2,6-二叔丁基-4-甲基苯酚	1695	1701
4-(2-苯基异丙基)苯酚	—	2271
2,4,6-三叔丁基苯酚	—	1722
4-茚满酚	1668	1689
5-茚满酚	1697	1712
5-甲基-4-茚满酚	1719	1741
6-甲基-4-茚满酚	1764	1784
7-甲基-4-茚满酚	1782	1802
α-萘酚	—	1944
β-萘酚	—	1969
7-甲基-2-萘酚	-	2062
5,6,7,8-四氢-1-萘酚	—	1835
2-烯丙基苯酚	1488	1498
2-烯丙基-6-甲基苯酚	1535	1542

表 14-29　酚类保留指数（四）[62]

柱温：170°C

化合物 \ 固定液	二苯并-18-冠-6	二苯并-24-冠-8	二环己-24-冠-8
2,6-二甲基酚	1741	1749	1593
2,5-二甲基酚	1858	1871	1724
2,4-二甲基酚	1858	1870	1721
2,3-二甲基酚	1919	1928	1767
3,5-二甲基酚	1935	1952	1789
3,4-二甲基酚	1976	1992	1820
邻甲酚	1785	1796	1593
间甲酚	1858	1870	1655
对甲酚	1849	1863	1651

表 14-30　甲酚类保留指数[37]

固定液	PS179	SE-30	聚苯醚六环	Carbowax 20M	聚苯醚③
化合物 \ 柱温/°C	220				160
邻甲酚	1900	1048	1433	2004	1354
间甲酚	1958	1075	1464	2093	1386
对甲酚	1979	1073	1457	2089	1385
2,4-二甲酚	1970	1162	1518	2087	1456
2,5-二甲酚	1988	1161	1507	2072	1453
3,5-二甲酚	2056	1179	1550	2174	1489
3,4-二甲酚	2131	1209	1572	2233	1530
α-萘酚	2863①	1517②	—		1944
β-萘酚	2916①	1531②		—	1969

①柱温 240°C。②柱温 200°C。③其结构不详。

表 14-31 二羟基酚与甲氧基酚保留指数[26]

固定液：聚苯醚（六环）

化合物 \ I \ 柱温/℃	140	160	180	化合物 \ I \ 柱温/℃	140	160	180
2-甲氧基酚	1414	1426	—	甲基-1,4-二羟基苯	—	1797	1803
3-甲氧基酚	1598	1607	—	3-乙基-邻苯二酚	1695	1706	1718
4-甲氧基酚	1598	1607	—	4-乙基间苯二酚	—	1868	1876
2-甲氧基-4-甲基酚	1507	1520	—	乙基-1,4-二羟基苯	-	1873	1881
2-叔丁基-4-甲基酚	—	1815	—	3,5-二甲基邻苯二酚	1732	1740	1748
2,3-二甲基酚	1590	1600	—	3,6-二甲基邻苯二酚	1674	1687	1700
邻苯二酚	1565	1576	1587	2,6-二甲基-1,4-二羟基苯		1858	1866
间苯二酚	1717	1727	1737	4-正丙基邻苯二酚	-	1861	1870
对苯二酚	1716	1724	1733	4-正丙基间苯二酚		1938	1950
3-甲基-邻苯二酚	1621	1635	1650	3-异丙基邻苯二酚	—	1758	1765
4-甲基-邻苯二酚	1667	1678	1688	4-异丙基邻苯二酚	—	1832	1830
2-甲基-间苯二酚		1759	1768	异丙基-1,4-二羟基苯	—	1917	1921
4-甲基-间苯二酚	—	1793	1800	4-叔丁基邻苯二酚	—	1894	1899
5-甲基-间苯二酚	—	1793	1804	3,5-二叔丁基邻苯二酚	—	1990	2001

第二节 有机酸与酯的保留指数

表 14-32 酚酸保留指数[2]

固定液	OV-1			固定液	OV-1		
化合物 \ I \ 柱温/℃	150	175	200	化合物 \ I \ 柱温/℃	150	175	200
苯基-2-丙烯酸	1505	1420	-	4-羟基-3,5-二甲氧基苯甲酸	1910	1780	1755
对羟基苯酸	1620	1515	—	3,4-二羟基苯酸	1850	1725	1720
4-羟基-3-甲氧基苯酸	1780	1650	—	阿魏酸	-	1985	1935
邻羟基肉桂酸	1810	1700	1655	咖啡酸	—	—	2020
对羟基肉桂酸	1955	1830	1670	芥子酸	—	—	2200
没食子酸	2040	1880	1845				

表 14-33 非糖类酸的保留指数[24]

固定液	OV-1	OV-17	QF-1	固定液	OV-1	OV-17	QF-1
化合物 \ I \ 柱温/℃	160		120	化合物 \ I \ 柱温/℃	160		120
莽草酸	1844	1871	2053	2-甲基戊二酸	1407	1484	1725
奎尼酸	1918	1851	2006	3-甲基戊二酸	1413	1493	1741
(羟乙酰)羟乙酸	1383	1501	1723	己二酸	1490	1586	1849
2-羟丙酰-2-羟丙酸	1376	1456	1667	3,3-二甲基戊二酸	1431	1489	1714
3-羟丙酰-3-羟丙酸	1567	1688	1966	庚二酸	1592	1692	1955
2-羟丁酰-2-羟丁酸	1515	1593	1793	辛二酸	1691	1797	2059
乙二酸	1100	1181	1475	壬二酸	1793	1898	2164
丙二酸	1174	1257	1515	顺丁烯二酸	1286	1404	1605
甲基丙二酸	1208	1264	1492	反丁烯二酸	1326	1378	1682
丁二酸	1291	1380	1616	顺甲基丁烯二酸	1331	1449	1644
二甲基丙二酸	1192	1226	1457	亚甲丁烯二酸	1321	1423	1636
乙基丙二酸	1275	1330	1558	丙烷-1,2,3-三羧酸	1736	1830	2143
甲基丁二酸	1307	1373	1613	反丙烯-1,2,3-三羧酸	1754	1854	2155
戊二酸	1386	1476	1728	1-羟基丙烷-1,2,3-三羧酸	1851	1907	2184
2,2-二甲基丁二酸	1317	1367	1586	2-羟基丙烷-1,2,3-三羧酸	1847	1886	2127
新-2,3-二甲基丁二酸	1360	1404	1647	磷酸	1263	1330	1683

表 14-34 无环的二醇与羟基酸的保留指数[43]

固定液：OV-1

化合物	柱温/℃	I	化合物	柱温/℃	I
1-苯基乙烷-1,2-二醇	155	1715	茚满-顺-1,2-二醇	155	1760
1,2-二苯基-1,2-乙烷二醇	200	2330	1,2,3,4-四氢化萘-顺-1,2-二醇	170	1890
十二烷-1,2-二醇	190	2030	1,2,3,4-四氢化萘-反-1,2-二醇	170	1920
十四烷-1,2-二醇	200	2225	1,2,3,4-四氢化萘-反-2,3-二醇	170	1960
2-羟基十二烷酸	190	2175	5-羟基-1,2,3,4-四氢化萘-顺-2,3-二醇	190	2200
2-羟基十四烷酸	200	2385	苊-顺-1,2-二醇	170	2070
3-羟基十八烷酸	235	2800	9,10-二氢菲-顺-9,10-二醇	215	2360
十六烷基-1,甘油基醚	235	2815	9,10-二氢菲-反-9,10-二醇	215	2370
十六烷基-2,甘油基醚	235	2855	1,2-二氢蒽-反-1,2-二醇	220	2500
1-甘油棕榈酸酯	235	2905	1,2,3,4-四氢蒽-顺-1,2-二醇	220	2455
2-甘油棕榈酸酯	235	2925	1,2,3,4-四氢蒽-反-1,2-二醇	220	2505
甲基(赤)-9,10-二羟基十八烷酸酯	235	2750	1,2,3,4,5,6,7,8-八氢化蒽-顺-1,2-二醇	220	2380
甲基(苏)-9,10-二羟基十八烷酸酯	235	2690			
2-羟基苯甲醇(水杨醇)	130	1560	1,2-二羟基萘	170	1915
2-(1-羟基乙基)环己醇	130	1625	2,3-二羟基萘	170	1990
环十二烷-顺-1,2-二醇	190	2140			

表 14-35 醇与羟基酸保留指数[55]

固定液：OV-1

化合物	柱温/℃	I	化合物	柱温/℃	I
丙烷-1,2-二醇	150	1770	9,10-二氢菲-顺-9,10-二醇	245	3125
丙烷-1,3-二醇	150	1860	1,2,3,4-四氢蒽-顺-1,2-二醇	255	3225
2,3-二甲基丁烷-2,3-二醇	150	1880	5-羟基-1,2,3,4-四氢萘-顺-2,3-二醇	220	2840
2-甲基戊烷-2,4-二醇	150	1885	顺-2-羟基环己烷脂肪酸	220	2480
茚满-顺-1,2-二醇	205	2450	反-2-羟基环己烷脂肪酸	220	2480
1,2,3,4-四氢萘-顺-1,2-二醇	220	2600	α-羟基-α-苯基丙酸	220	2450
1,2,3,4-四氢萘-反-2,3-二醇	220	2690	左旋-2-氨基丙-1-醇	150	1840
苊-顺-1,2-二醇	215	2865	3-氨基丙-1-醇	150	1920
二环己基-1,1'-二醇	225	2615	2-氨基-2-苯基乙醇	205	2480
环十二烷-顺-1,2-二醇	230	2855	β-羟基-β-苯基乙胺	205	2490
2-乙基-2-甲基壬烷-4,6-二醇	215	2150			

表 14-36 C_6～C_{24}酸甲酯保留指数[43]

柱温：240℃

化合物 \ 固定液 (I)	DB-1	CP-Sil5	DB-WAX	CP-WAX52	化合物 \ 固定液 (I)	DB-1	CP-Sil5	DB-WAX	CP-WAX52
己酸甲酯	—	908.0	—	—	二十酸甲酯	—	2311.7	2646.1	2616.5
辛酸甲酯	1126.0	1112.2	1436.7	1398.5	二十一酸甲酯		2409.6	2747.8	2715.8
壬酸甲酯	1222.4	1212.8	1536.0	1489.8	二十二酸甲酯		2512.9	2848.2	2820.9
癸酸甲酯	1321.2	1312.6	1636.3	1595.9	二十三酸甲酯			2951.4	2922.1
十一酸甲酯	1422.0	1411.4	1732.2	1699.2	二十四酸甲酯	—	—	3052.7	3024.1
十二酸甲酯	1517.6	1509.8	1833.9	1802.5	肉豆蔻脑酸甲酯	1703.1	1690.8	2000.0	2052.5
十三酸甲酯	1614.6	1609.2	1936.1	1905.6	棕榈油酸甲酯	1896.1	1884.3	2276.7	2242.4
十四酸甲酯	1717.8	1710.1	2037.3	2005.0	油酸甲酯	2085.2	2071.5	2471.9	2548.5
十五酸甲酯	1817.1	1811.0	2137.6	2106.6	亚油酸甲酯	2092.2	2077.7	2522.8	2485.3
十六酸甲酯	1914.7	1911.7	2243.1	2205.1	亚麻酸甲酯	2092.2	2077.7	2590.3	2439.7
十七酸甲酯	2014.1	2010.5	2341.0	2306.8	芥酸甲酯	—	2472.8	2877.9	2844.3
十八酸甲酯	2113.4	2109.4	2441.7	2409.7	神经酸甲酯	—	—	3079.1	3048.2
十九酸甲酯	2211.1	2210.3	2513.0	2512.9					

表 14-37 C_9～C_{22}酸甲酯保留指数[31]

固定液	氢化的 Apeizon M	$C_{87}H_{176}$	OV-17	DEGS	固定液	氢化的 Apeizon M	$C_{87}H_{176}$	OV-17	DEGS
柱温/℃ I 化合物	230	200	200	200	柱温/℃ I 化合物	230	200	200	200
癸酸甲酯	1256	1266	1410	1794	十八酸甲酯	2059	2061	2215	2599
十二酸甲酯	1457	1468	1613	2003	二十酸甲酯	2257	2262	2414	2796
十四酸甲酯	1659	1659	1814	2201	二十二酸甲酯	2454	2460		2993
十六酸甲酯	1859	1860	2015	2401					

表 14-38 C_{12}～C_{22}酸甲酯保留指数[11]

固定液	SE-30	OV-225	DEGS	固定液	SE-30	OV-225	DEGS
柱温/℃ I 化合物	200	200	170	柱温/℃ I 化合物	200	200	170
月桂酸甲酯	1514	1741	175	二十一酸甲酯	2414	2659	2595
肉豆蔻甲酯	1713	1945	1939	甲基二十二酯	2514	2761	2690
软脂酸甲酯	1913	2149	2127	甲基油酸酯	2085	2367	2326
硬脂酸甲酯	2113	2353	2315	甲基亚油酸酯	2085	2400	2363
十九酸甲酯	2213	2455	2407	甲基亚麻酸酯	2085	2442	2416
花生酸甲酯	2314	2557	2501	甲基花生四烯酸酯	2235	2617	2576

表 14-39 C_{12}～C_{24}酸甲酯保留指数[22]

柱温：200℃

固定液 I 化合物	SE-30	Silar5CP	固定液 I 化合物	SE-30	Silar5CP
正十二酸甲酯	1513	1790	瓦克岑酸甲酯	2089	2420
正十四酸甲酯	1713	1990	油酸甲酯	2081	2414
正十五酸甲酯	1813	2089	岩芹酸甲酯	2081	2409
正十六酸甲酯	1913	2189	11-二十烯酸甲酯	2279	2610
正十七酸甲酯	2013	2289	5-二十烯酸甲酯	2281	2598
正十八酸甲酯	2113	2389	芥酸甲酯	2480	2807
正十九酸甲酯	2214	2488	9-二十二烯酸甲酯	2479	2801
正二十酸甲酯	2314	2587	神经酸甲酯	2680	3003
正二十一酸甲酯	2414	2686	十八碳-9,12-二烯酸甲酯	2077	2467
正二十二酸甲酯	2515	2786	十八碳-9,12,15-三烯酸甲酯	2079	2510
正二十四酸甲酯	2715	2984	十八碳-6,9,12-三烯酸甲酯	2053	2484
12-甲基十三酸甲酯	1678	1948	二十碳-11,14-二烯酸甲酯	2279	2653
14-甲基十五酸甲酯	1877	2149	二十碳-11,14,17-三烯酸甲酯	2279	2705
16-甲基十七酸甲酯	2077	2348	二十碳-8,11,14-三烯酸甲酯	2249	2676
18-甲基十九酸甲酯	2277	2546	二十碳-5,8,11,14-四烯酸甲酯	2231	2688
12-甲基十四酸甲酯	1786	2061	二十碳-5,8,11,14,17-五烯酸甲酯	2233	2741
14-甲基十六酸甲酯	1985	2263	二十二碳-7,10,13,16-四烯酸甲酯	2427	2890
16-甲基十八酸甲酯	2184	2460	二十二碳-7,10,13,16,19-五烯酸甲酯	2426	2943
8-甲基二十酸甲酯	2385	2659	二十二碳-4,7,10,13,16,19-六烯酸甲酯	2409	2954
棕榈油酸甲酯	1888	2222			

表 14-40 C_{17}酸甲酯保留指数[18]

固定液：SE-30　　柱温：190℃

化合物	I	化合物	I
正十七酸甲酯	2009	2-羟基-6-甲基十六酸甲酯	2067
15-甲基十六酸甲酯	1974	2-羟基-2-甲基十六酸甲酯	2025
14-甲基十六酸甲酯	1983	2-(三甲基硅氧)十七酸甲酯	2221
6-甲基十六酸甲酯	1953	2-(三甲基硅氧)-15-甲基十六酸甲酯	2185
2-甲基十六酸甲酯	1944	2-(三甲基硅氧)-14-甲基十六酸甲酯	2193
2-羟基十七酸甲酯	2128	2-(三甲基硅氧)-6-甲基十六酸甲酯	2154
2-羟基-15-甲基十六酸甲酯	2089	2-(三甲基硅氧)-2-甲基十六酸甲酯	2137
2-羟基-14-甲基十六酸甲酯	2102		

表 14-41 C_2～C_{20}酸乙酯保留指数（一）[49]

固定液：SE-30

化合物 \ I \ 柱温/℃	140	160	180	200	220	240	260
乙酸乙酯	655	700	760	—	—	-	
丙酸乙酯	707	739	788	—	—	—	—
丁酸乙酯	796	806	846	910	—	—	—
戊酸乙酯	883	896	913	950	980	--	
己酸乙酯	979	989	1000	1023	1031	1082	—
庚酸乙酯	1077	1081	1096	1119	1116	1134	—
辛酸乙酯	1176	1178	1187	1193	1218	1219	1099
壬酸乙酯	1274	1277	1284	1284	1304	1314	1209
癸酸乙酯	1376	1378	1380	1385	1400	1405	1320
十一酸乙酯	1476	1477	1478	1479	1493	1500	1446
十二酸乙酯	1576	1578	1578	1577	1588	1594	1549
十三酸乙酯	1677	1676	1676	1678	1689	1693	1667
十四酸乙酯	1777	1777	1777	1779	1787	1788	1766
十五酸乙酯		1876	1876	1879	1884	1887	1867
十六酸乙酯	-	1976	1976	1979	1982	1983	1973
十七酸乙酯		—	2074	2078	2082	2083	2073
十八酸乙酯		--	2175	2179	2183	2179	2175
十九酸乙酯	—		—	2278	2282	2281	2277
二十酸乙酯		—	—	2378	2383	2382	2378

表 14-42 C_2～C_{20}酸乙酯保留指数（二）[49]

固定液：OV 351

化合物 \ I \ 柱温/℃	120	140	160	180	200	220
乙酸乙酯	—		—	—	—	—
丙酸乙酯	910	-	—	—	-	—
丁酸乙酯	1025	1051	—	—		—
戊酸乙酯	1125	1159	1113	--	—	--
己酸乙酯	1231	1267	1220	—	—	—
庚酸乙酯	1328	1375	1325	1369	—	—
辛酸乙酯	1442	1477	1437	1458	—	-
壬酸乙酯	1548	1579	1538	1580	1531	—
癸酸乙酯	1647	1668	1639	1678	1636	—

续表

化合物 \ 柱温/°C	120	140	160	180	200	220
十一酸乙酯	1744	1763	1739	1775	1740	1757
十二酸乙酯	1842	1860	1840	1874	1846	1873
十三酸乙酯	1941	1955	1940	1966	1948	1985
十四酸乙酯	2041	2053	2043	2063	2055	2077
十五酸乙酯	2140	2150	2146	2159	2157	2172
十六酸乙酯	2240	2248	2245	2259	2257	2273
十七酸乙酯	2342	2348	2343	2359	2357	2370
十八酸乙酯	-	2446	2444	2459	2458	2467
十九酸乙酯		2547	2547	2563	2559	2565
二十酸乙酯	—	2649	2649	2662	2660	2664

表 14-43 脂肪酸乙酯保留指数[36]

柱温：120°C

化合物 \ 固定液 I	$C_{87}H_{176}$	SE 30	OV-7	OV-25	OV 105	PEG400	Silar 7CP	Silar 9CP	Silar 10C
戊酸乙酯	-	876	941	1014		—	—		—
2,2-二甲基丙酸乙酯		771	809		—	—			—
2-甲基丁酸乙酯	794	834	882	959	1151	1152	1185	1226	1263
己酸乙酯		976	1045	1118	—	—	—		—
2,3-二甲基丁酸乙酯	878	908	957	1030	1233	1220	1260	1296	1334
3,3-二甲基丁酸乙酯	856	878	925	991	1188	1183	1219	1264	1320
2-乙基-2-甲基丁酸乙酯	960		1028	1099	1292	1276	1319	1381	1418
2-乙基-3-甲基丁酸乙酯	957	983	1030	1101	1287	1281	1317	1383	1420
2,2,3-三甲基丁酸乙酯	947	971	1017	1087	1281	1265	1304	1360	1400
2,3,3-三甲基丁酸乙酯	935	965	1011	1081	1276	1262	1301	1363	1404
2,2-二乙基丁酸乙酯	1056	1083	1131	1204	1048	1383	1425	1484	1524
2-异丙基-3-甲基丁酸乙酯	1016	1047	1091	1159	1356	1334	1375	1408	1443
2-乙基-3,3-二甲基丁酸乙酯	—	1033	1070	1142	—	—		1359	1425
2,2,3,3-四甲基丁酸甲酯	961	987	1036	1117	1330	1320	1358	1407	1452
2-异丙基-3,3-二甲基丁酸乙酯	1072	1102		—	1389	1372	1413	1457	1509
2-乙基-2,3,3-三甲基丁酸乙酯	1124	1146	1194	1271	1177	1448	1495	1543	1606
3,3-二甲基-2-叔丁基丁酸乙酯	1165	1185	1228	1298	1191	1466	1504	1550	1587
3,3-二甲基-2-异丙基-2-甲基丁酸乙酯	1222	1237	1286	1371		1560	—	1670	1713
3,3-二甲基-2,2-二乙基丁酸乙酯	1234	1248	1297	1377	1597	1564	1601	1659	1698

表 14-44 脂肪酸酯类保留指数[15]

柱温：81°C

化合物 \ 固定液 I	Carbowax 1540	角鲨烷	化合物 \ 固定液 I	Carbowax 1540	角鲨烷
丁酸甲酯	994.5	661.3	己酸乙酯	1236.3	938.9
戊酸甲酯	1094.9	764.4	庚酸乙酯	1337.2	1036.8
己酸甲酯	1192.5	864.8	辛酸乙酯	1432.5	1136.6
庚酸甲酯	1292.5	964.0	壬酸乙酯	1530.5	—
辛酸甲酯	1389.2	1064.0	癸酸乙酯	1628.0	-
壬酸甲酯	1489.0	1163.8	丁酸丙酯	1129.8	837.5
癸酸甲酯	1587.5	1263.6	戊酸丙酯	1227.8	937.1
丁酸乙酯	1043.1	739.2	己酸丙酯	1320.0	1031.5
戊酸乙酯	1141.1	840.2	庚酸丙酯	1420.7	1127.2

续表

化合物 \ 固定液 I	Carbowax 1540	角鲨烷
辛酸丙酯	1513.4	—
壬酸丙酯	1612.3	—
癸酸丙酯	1708.7	—
丁酸丁酯	1223.4	936.3
戊酸丁酯	1319.3	1034.6
己酸丁酯	1411.5	1127.0
庚酸丁酯	1511.5	
辛酸丁酯	1605.5	—
壬酸丁酯	1701.2	—
癸酸丁酯	1796.8	—
丁酸戊酯	1319.4	1034.4
戊酸戊酯	1415.5	1131.7
己酸戊酯	1505.7	—
庚酸戊酯	1600.6	
辛酸戊酯	1693.8	—
壬酸戊酯	1786.9	—
丁酸己酯	1414.1	1132.9
戊酸己酯	1511.5	—
己酸己酯	1599.6	—
庚酸己酯	1695.9	—
辛酸己酯	1786.6	—
甲酸丙酯	931.3	560.8
甲酸丁酯	1028.5	665.9
甲酸戊酯	1128.2	766.6
甲酸己酯	1227.2	868.9
甲酸庚酯	1325.6	971.3
甲酸辛酯	1424.4	1073.6
乙酸乙酯	895.8	546.0
乙酸丙酯	982.2	648.6
乙酸丁酯	1080.3	751.7
乙酸戊酯	1179.7	852.1
乙酸己酯	1275.9	950.3
乙酸庚酯	1374.7	1053.4
乙酸辛酯	1472.7	1154.6
丙酸乙酯	963.1	645.7
丙酸丙酯	1048.8	746.1
丙酸丁酯	1146.1	846.8
丙酸戊酯	1243.1	916.1
丙酸己酯	1340.6	1044.4
丙酸庚酯	1437.9	1145.0
丙酸辛酯	1535.1	—
丁酸庚酯	1508.8	—
丁酸辛酯	1603.7	—
戊酸庚酯	1605.3	—
戊酸辛酯	1700.0	—
己酸庚酯	1692.4	—
己酸辛酯	1785.7	—
戊酸异丙酯	1140.2	878.7
己酸异丙酯	1236.3	976.1
庚酸异丙酯	1337.2	1074.8
辛酸异丙酯	1433.2	1173.2
壬酸异丙酯	1529.9	—
癸酸异丙酯	1626.9	
丁酸异丁酯	1165.1	898.6
戊酸异丁酯	1260.5	994.9
己酸异丁酯	1352.7	1090.9
庚酸异丁酯	1452.4	1186.9
辛酸异丁酯	1546.3	1283.0
壬酸异丁酯	1641.7	—
丁酸异戊酯	1269.3	999.9
戊酸异戊酯	1357.5	1093.1
己酸异戊酯	1435.9	1184.8
庚酸异戊酯	1516.8	—

表 14-45　C_1～C_4 酸酯保留指数[15]

柱温：120℃

化合物 \ 固定液 I	苯二甲酸二异癸酯	Pluronic P 65	苯二甲酸双(2-乙氧基乙基)酯
甲酸甲酯	482	627	641
甲酸乙酯	577	708	728
乙酸甲酯	—	711	734
甲酸异丙酯	631	744	770
乙酸乙酯	659	772	801
丙酸甲酯	679	793	818
甲酸丙酯	684	802	828
乙酸异丙酯	697	796	827
异丁酸甲酯	725	825	854
甲酸仲丁酯	740	845	877
乙酸叔丁酯	731	817	848
甲酸异丁酯	749	859	887
丙酸乙酯	749	854	883
乙酸丙酯	757	867	897
丁酸甲酯	770	881	909
甲酸丁酯	786	906	932
丙酸异丙酯	780	868	905
乙酸仲丁酯	792	890	924
乙酸异丁酯	817	914	948
丙酸丙酯	846	947	980
乙酸-2-甲基-2-丁基酯	817	931	961
乙酸丁酯	860	967	998
丁酸异丙酯	875	957	990
甲酸戊酯	892	1010	1043
丙酸异丁酯	909	999	1036
乙酸异戊酯	925	1030	1067
丁酸丙酯	940	1037	1072
丙酸丁酯	951	1051	1087
乙酸戊酯	964	1074	1110
甲酸己酯	997	1120	1147
丙酸异戊酯	1017	1111	1150
乙酸-2-乙基-1-丁基酯	1025	1127	1164
丁酸丁酯	1043	1139	1176
乙酸环己基酯	1103	1239	1271
丁酸异戊酯	1103	1197	1236

表 14-46　$C_1 \sim C_6$ 酸酯保留指数（一）[12]

固定液：SE-30　　柱温：150℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
甲酸甲酯	380	丁酸甲酯	714	3-甲基丁基酸甲酯	764
甲酸乙酯	487	丁酸乙酯	788	3-甲基丁基酸乙酯	840
甲酸丙酯	592	丁酸丙酯	884	3-甲基丁基酸丙酯	937
甲酸异丙酯	528	丁酸异丙酯	823	3-甲基丁基酸异丙酯	883
甲酸丁酯	703	丁酸丁酯	980	3-甲基丁基酸丁酯	1030
甲酸-2-甲基丙基酯	660	丁酸-2-甲基丙基酯	937	3-甲基丁基酸-3-甲基丙基酯	994
甲酸戊酯	812	丁酸戊酯	1075	3-甲基丁基酸戊酯	1125
甲酸-3-甲基丁基酯	774	丁酸-3-甲基丁基酯	1039	3-甲基丁基酸-3-甲基丁基酯	1088
乙酸甲酯	506	异丁酸甲酯	669	己酸甲酯	913
乙酸乙酯	571	异丁酸乙酯	738	己酸乙酯	980
乙酸丙酯	683	异丁酸丙酯	836	己酸丙酯	1077
乙酸异丙酯	625	异丁酸异丙酯	785	己酸异丙酯	1018
乙酸丁酯	787	异丁酸丁酯	933	己酸丁酯	1170
乙酸-2-甲基丙基酯	750	异丁酸-2-甲基丙基酯	900	己酸-2-甲基丙基酯	1131
乙酸戊酯	898	异丁酸戊酯	1032	己酸戊酯	1268
乙酸-3-甲基丁基酯	854	异丁酸-3-甲基丁基酯	998	己酸-3-甲基丁基酯	1227
丙酸甲酯	607	戊酸甲酯	814	4-甲基戊基酸甲酯	876
丙酸乙酯	679	戊酸乙酯	879	4-甲基戊基酸乙酯	947
丙酸丙酯	787	戊酸丙酯	980	4-甲基戊基酸丙酯	1038
丙酸异丙酯	717	戊酸异丙酯	921	4-甲基戊基酸异丙酯	985
丙酸丁酯	891	戊酸丁酯	1074	4-甲基戊基酸丁酯	1138
丙酸-2-甲基丙酯	853	戊酸-2-甲基丙基酯	1027	4-甲基戊基酸-4-甲基丙基酯	1100
丙酸戊酯	998	戊酸戊酯	1170	4-甲基戊基酸戊酯	1232
丙酸-3-甲基丁酯	955	戊酸-3-甲基丁基酯	1134	4-甲基戊基酸-3-甲基丁基酯	1198

表 14-47　$C_1 \sim C_6$ 酸酯保留指数（二）[12]

柱温：150℃

化合物 \ 固定液 (I)	SE-30	OV-7	DC-710	OV-25	全苯基聚硅氧烷	DC-230	DC-530	XE-60	XF 1150	OV-225	Silar 5CP	F-100	F-500	QF-1
苯	674	719	767	830	860	880	733	863	1014	898	998	720	761	802
丁醇	644	706	760	812	869	683	829	967	1146	977	1090	715	763	861
2-戊酮	671	746	793	843	917	701	854	977	1139	986	1089	801	864	1017
硝基丙烷	718	832	892	961	1013	771	829	1159	1379	1150	1291	887	960	1131
吡啶	750	865	912	1005	1117	809	846	1113	1289	1148	1275	880	943	1081
2-甲基-2-戊醇	722	777	800	847	881	685	842	984	1115	978	1073	794	838	918
乙酸特丁酯	686	731	761	795	833	713	729	857	972	873	947	776	815	909
甲酸甲酯	386	453	496	571	618	419	488	641	817	682	762	509	563	689
甲酸乙酯	495	552	586	655	715	521	587	754	907	755	860	604	658	780
甲酸丙酯	602	667	696	756	813	626	686	848	1003	862	955	705	751	883
甲酸丁酯	707	774	804	852	907	734	792	960	1092	967	1059	810	860	984
甲酸戊酯	810	879	912	952	998	835	885	1064	1187	1070	1156	912	954	1089
甲酸己酯	907	976	1011	1047	1092	937	980	1166	1279	1167	1252	1013	1059	1189
甲酸异丙酯	552	604	635	686	751	553	622	760	924	772	869	649	712	832
甲酸异丁酯	670	731	766	803	858	684	739	915	1059	918	1015	776	823	959
甲酸异戊酯	777	840	872	915	958	795	849	1027	1149	1030	1113	879	928	1060
乙酸甲酯	509	559	609	693	732	519	569	737	894	759	859	617	672	772

续表

I 固定液 / 化合物	SE-30	OV-7	DC 710	OV-25	全苯基聚硅氧烷	DC-230	DC-530	XE 60	XF-1150	OV-225	Silar 5CP	F-400	F-500	QF-1
乙酸乙酯	592	648	690	760	803	599	642	815	927	835	923	687	742	855
乙酸丙酯	695	755	796	853	895	704	747	920	1040	932	1013	796	845	960
乙酸丁酯	794	855	895	949	991	810	846	1022	1135	1030	1116	899	945	1064
乙酸戊酯	891	958	996	1044	1081	914	942	1122	1227	1132	1212	999	1045	1169
乙酸己酯	988	1056	1092	1133	1174	1012	1040	1221	1313	1229	1301	1098	1143	1267
乙酸异丙酯	613	686	722	782	846	635	672	842	949	840	914	735	777	899
乙酸异丁酯	750	810	846	898	942	770	820	976	1086	977	1063	859	903	1030
乙酸异戊酯	859	922	955	1001	1042	880	917	1086	1186	1087	1172	965	1001	1133
丙酸甲酯	617	667	710	775	829	610	663	837	976	851	947	704	754	842
丙酸乙酯	692	743	783	845	885	692	740	897	1023	905	998	781	827	930
丙酸丙酯	789	851	884	934	977	792	835	1003	1115	1013	1098	883	928	1033
丙酸丁酯	886	949	984	1032	1069	896	934	1104	1204	1113	1195	984	1028	1133
丙酸戊酯	980	1047	1082	1125	1166	1003	1031	1202	1292	1211	1289	1083	1127	1234
丙酸己酯	1074	1142	1176	1115	1255	1100	1126	1300	1379	1307	1378	1181	1222	1332
丙酸异丙酯	733	785	817	971	894	736	777	920	1023	928	1001	818	864	972
丙酸异丁酯	848	906	938	985	1010	857	895	1057	1158	1062	1141	944	990	1107
丙酸异戊酯	948	1014	1042	1086	1118	963	1003	1156	1252	1169	1243	1048	1093	1205
丁酸甲酯	702	767	803	868	907	719	757	923	1053	938	1032	802	846	960
丁酸乙酯	778	840	876	931	968	794	828	986	1107	999	1085	876	918	1037
丁酸丙酯	875	938	973	1022	1056	896	924	1089	1192	1098	1179	971	1017	1136
丁酸丁酯	969	1036	1069	1114	1147	994	1021	1187	1278	1193	1272	1070	1114	1234
丁酸戊酯	1062	1131	1164	1208	1241	1091	1116	1284	1364	1288	1362	1168	1212	1331
丁酸己酯	1156	1225	1258	1292	1331	1186	1209	1380	1449	1388	1451	1264	1306	1427
丁酸异丙酯	820	878	905	955	983	835	864	1010	1105	1019	1091	910	957	1075
丁酸异丁酯	933	993	1023	1065	1093	955	981	1143	1232	1146	1217	1031	1077	1205
丁酸异戊酯	1029	1093	1124	1163	1196	1056	1080	1243	1323	1247	1316	1134	1177	1301
戊酸甲酯	807	871	907	961	1001	821	863	1027	1145	1042	1131	906	960	1067
戊酸乙酯	876	941	975	1014	1060	896	930	1085	1190	1105	1180	978	1021	1141
戊酸丙酯	971	1036	1069	1111	1147	994	1023	1179	1277	1196	1221	1074	1116	1240
戊酸丁酯	1063	1130	1163	1205	1237	1089	1116	1279	1360	1289	1361	1171	1212	1334
戊酸戊酯	1155	1222	1257	1204	1329	1185	1210	1375	1445	1382	1451	1267	1307	1429
戊酸己酯	1247	1316	1349	1382	1420	1287	1304	1470	1530	1476	1539	1362	1400	1524
戊酸异丙酯	915	971	1000	1046	1079	932	961	1105	1190	1116	1180	1014	1056	1174
戊酸异丁酯	1027	1087	1117	1156	1187	1051	1077	1235	1315	1240	1307	1132	1174	1301
戊酸异戊酯	1132	1185	1217	1253	1286	1150	1173	1333	1404	1340	1405	1233	1274	1397
己酸甲酯	902	974	1006	1056	1091	925	960	1133	1237	1140	1225	1003	1050	1162
己酸乙酯	976	1045	1073	1118	1148	995	1026	1196	1278	1203	1275	1075	1119	1231
己酸丙酯	1064	1138	1164	1207	1239	1090	1119	1283	1362	1295	1363	1173	1213	1326
己酸丁酯	1156	1231	1256	1295	1329	1184	1209	1377	1445	1383	1451	1265	1307	1418
己酸戊酯	1246	1325	1349	1384	1419	1278	1304	1471	1529	1408	1539	1361	1402	1514
己酸己酯	1337	1417	1440	1470	1508	1371	1397	1565	1613	1575	1626	1456	1494	1605
己酸异丙酯	1008	1074	1015	1131	1172	1028	1055	1207	1279	1206	1275	1108	1151	1263
己酸异丁酯	1119	1189	1211	1246	1279	1128	1171	1332	1400	1333	1397	1225	1265	1388
己酸异戊酯	1212	1287	1308	1342	1376	1228	1266	1430	1489	1432	1494	1323	1367	1482
异丁酸甲酯	665	823	764	812	848	677	708	870	994	885	957	758	800	913

续表

I 固定液 / 化合物	SE-30	OV-7	DC-710	OV-25	全苯基聚硅氧烷	DC-230	DC-550	XE-60	XF-1150	OV-225	Silar 5CP	F-400	F-500	QF-1
异丁酸乙酯	732	893	831	875	906	757	779	968	1039	935	1016	831	871	997
异丁酸丙酯	836	891	925	968	994	851	878	1035	1127	1041	1107	930	970	1086
异丁酸丁酯	931	987	1019	1059	1091	945	974	1130	1217	1136	1201	1028	1067	1185
异丁酸戊酯	1024	1082	1115	1155	1180	1045	1070	1225	1302	1230	1294	1125	1163	1283
异丁酸己酯	1117	1177	1208	1238	1272	1141	1165	1323	1392	1323	1383	1221	1258	1378
异丁酸异丙酯	780	829	849	889	927	786	814	953	1040	947	1014	865	900	1018
异丁酸异丁酯	899	946	975	1008	1039	913	937	1096	1172	1086	1149	992	1031	1156
异丁酸异戊酯	994	1045	1075	1109	1141	1010	1031	1196	1261	1188	1249	1088	1126	1252
异戊酸甲酯	763	823	854	902	945	777	814	969	1088	982	1063	860	896	1014
异戊酸乙酯	839	893	925	967	1005	853	881	1033	1128	1042	1114	926	975	1086
异戊酸丙酯	929	987	1018	1059	1091	948	976	1129	1215	1137	1206	1033	1069	1182
异戊酸丁酯	1021	1081	1111	1149	1178	1044	1070	1224	1302	1231	1296	1128	1163	1278
异戊酸戊酯	1112	1174	1204	1238	1272	1139	1164	1318	1386	1325	1386	1224	1259	1372
异戊酸己酯	1204	1267	1296	1326	1361	1233	1258	1414	1472	1417	1474	1319	1353	1467
异戊酸异丙酯	871	923	950	989	1017	889	915	1049	1138	1064	1127	970	1008	1122
异戊酸异丁酯	985	1039	1066	1096	1125	1007	1031	1177	1259	1184	1246	1088	1127	1248
异戊酸异戊酯	1081	1136	1164	1196	1225	1104	1128	1278	1346	1281	1343	1187	1225	1341
异己酸甲酯	875	936	970	1019	1055	892	927	1094	1202	1104	1177	970	1022	1128
异己酸乙酯	943	1001	1036	1078	1111	963	992	1158	1237	1163	1219	1037	1090	1200
异己酸丙酯	1035	1091	1128	1165	1202	1056	1083	1249	1326	1253	1313	1137	1184	1290
异己酸丁酯	1125	1183	1220	1252	1290	1150	1176	1340	1408	1345	1402	1232	1277	1383
异己酸戊酯	1215	1281	1313	1340	1381	1214	1268	1433	1498	1138	1490	1329	1371	1478
异己酸己酯	1306	1374	1404	1427	1470	1337	1361	1527	1578	1529	1575	1424	1464	1569
异己酸异丙酯	979	1028	1059	1095	1134	988	1020	1169	1242	1172	1229	1079	1123	1226
异己酸异丁酯	1089	1117	1175	1200	1240	1110	1135	1293	1361	1309	1340	1197	1338	1351
异己酸异戊酯	1181	1244	1272	1298	1337	1209	1231	1393	1452	1391	1442	1296	1338	1444
2-甲基戊酸甲酯	853	908	915	989	1059	864	900	1054	1152	1065	1131	917	986	1084
2-甲基戊酸乙酯	947	973	1006	1053	1097	930	963	1118	1190	1121	1173	1015	1052	1151
2-甲基戊酸丙酯	1009	1064	1096	1136	1184	1026	1055	1204	1278	1213	1266	1111	1146	1246
2-甲基戊酸丁酯	1097	1157	1189	1222	1275	1118	1145	1296	1359	1303	1352	1203	1238	1337
2-甲基戊酸戊酯	1187	1246	1279	1310	1361	1212	1237	1389	1412	1394	1440	1297	1332	1430
2-甲基戊酸己酯	1277	1337	1370	1398	1449	1305	1331	1183	1526	1486	1527	1391	1124	1522
2-甲基戊酸异丙酯	952	999	1021	1060	1114	960	992	1121	1191	1128	1176	1056	1082	1183
2-甲基戊酸异丁酯	1064	1116	1144	1179	1120	1081	1109	1254	1317	1257	1306	1166	1203	1307
2-甲基戊酸异戊酯	1153	1208	1238	1267	1319	1174	1202	1352	1401	1350	1391	1262	1298	1410
2-乙基丁酸甲酯	845	899	934	979	1043	851	894	1049	1143	1053	1116	930	974	1066
2-乙基丁酸乙酯	914	969	1000	1037	1092	924	960	1122	1182	1113	1171	1003	1045	1140
2-乙基丁酸丙酯	1005	1060	1092	1130	1176	1020	1051	1204	1274	1206	1260	1100	1140	1231
2-乙基丁酸丁酯	1093	1150	1182	1217	1265	1112	1141	1295	1353	1296	1343	1193	1231	1327
2-乙基丁酸戊酯	1183	1241	1273	1303	1353	1205	1233	1390	1436	1387	1434	1287	1325	1419
2-乙基丁酸己酯	1273	1332	1364	1393	144[illegible]	1298	1326	1482	1520	1478	1520	1381	1417	1510
2-乙基丁酸异丙酯	951	996	1022	1058	1101	951	993	1120	1193	125	1174	1040	1080	1173
2-乙基丁酸异丁酯	1060	1112	1139	1167	1216	1075	1107	1253	1310	1249	1294	1158	1196	1300
2-乙基丁酸异戊酯	1149	1202	1232	1263	1310	1169	1198	1352	1393	1343	1387	1253	1290	1386

表 14-48　C_3 酸酯保留指数[47]

固定液	SE-30						OV-351					
I 化合物 \ 柱温/℃	60	80	100	120	140	160	60	80	100	120	140	160
丙酸甲基乙基酯	751	739	739	739	747	—	986	996	1028	1092	1206	—
丙酸二甲基乙基酯	790	781	776	776	780	—	986	996	1028	1092	1206	
丙酸-1-甲基丙基酯	845	838	829	825	845	—	1067	1070	1092	1145	1241	—
丙酸-1,1-二甲基丙基酯	893	887	847	873	888	—	1087	1089	1108	1153	1241	
丙酸-2-甲基丙基酯	862	856	880	842	860	—	1100	1094	1108	1153	1241	—
丙酸-1,2-二甲基丙基酯	915	910	901	893	913	—	1125	1121	1130	1172	1254	—
丙酸-1-甲基丁基酯	932	926	916	908	928	—	1148	1145	1159	1202	1283	
丙酸-3-甲基丁基酯	961	950	947	937	958	—	1198	1196	1206	1238	1315	
丙酸-2-丙烯基酯	—	796	774	767	793	818		1128	1130	1167	1245	—
丙酸-1-甲基-3-丁烯基酯		926	902	891	913	929	—	1196	1197	1225	1301	1364
丙酸-3-丁烯基酯	—	889	864	855	877	891	—	1200	1203	1230	1301	1364
丙酸-4-戊烯基酯	—	990	969	958	978	986	—	1300	1302	1305	1370	1419
丙酸-2-丙基酯	—	809	784	773	797	818	—	1312	1305	1305	1370	1419
丙酸-反-3-己基酯		1090	1071	1063	1080	1085	—	1384	1383	1382	1443	1486
丙酸-顺-3-己基酯	—	1092	1074	1066	1085	1090	—	1392	1391	1390	1451	1487

表 14-49　C_5 酸酯保留指数[14]

柱温：150℃

I 化合物 \ 固定液	F 400	F 500	QF-1	XE-60	OV-225	Silar5CP	XF-1150	SE-30	OV-7	DC-710	100%苯基硅油	DC-230	DC-530
苯	720	761	802	863	898	998	1014	674	719	767	860	688	733
丁醇	715	763	861	967	977	1090	1146	644	706	760	869	683	829
2-戊酮	801	864	1017	977	986	1089	1139	674	746	793	917	701	854
硝基丙烷	887	960	1151	1159	1150	1291	1379	718	832	892	1018	771	829
吡啶	880	943	1081	1113	1148	1275	1289	750	865	922	1117	809	846
2-甲基-2-戊醇	794	838	918	984	978	1073	1115	722	777	800	881	685	842
乙酸特丁酯	776	815	909	857	873	947	972	686	731	761	833	743	729
戊酸甲酯	906	960	1067	1027	1042	1131	1145	807	871	907	1001	821	863
戊酸乙酯	978	1021	1141	1085	1105	1180	1190	876	941	975	1060	896	930
戊酸丙酯	1074	1116	1240	1179	1196	1211	1277	971	1036	1069	1147	994	1023
戊酸丁酯	1171	1212	1334	1279	1289	1361	1360	1063	1130	1163	1237	1089	1116
戊酸戊酯	1267	1307	1429	1375	1382	1451	1445	1155	1222	1257	1329	1185	1210
戊酸己酯	1362	1400	1524	1470	1476	1539	1530	1247	1316	1349	1420	1287	1304
戊酸异丙酯	1014	1056	1174	1105	1116	1180	1190	915	971	1000	1079	932	961
戊酸异丁酯	1132	1174	1301	1235	1240	1307	1315	1027	1087	1117	1187	1051	1077
戊酸异戊酯	1233	1274	1397	1333	1340	1405	1401	1132	1185	1217	1286	1150	1173
叔戊酸甲酯	797	828	915	879	897	951	975	706	749	783	860	721	751
叔戊酸乙酯	868	902	977	941	942	1000	1021	771	809	842	889	785	814
叔戊酸丙酯	962	1000	1087	1037	1038	1097	1128	670	913	939	994	881	914
叔戊酸丁酯	1059	1105	1183	1129	1131	1201	1217	965	1008	1031	1084	976	1008
叔戊酸戊酯	1151	1191	1283	1222	1222	1294	1314	1061	1103	1124	1184	1069	1102
叔戊酸己酯	—	—	—	—	—	1391	1414	—	—		1276	—	—
叔戊酸异丙酯	896	930	1018	949	948	994	1016	809	841	863	875	815	839
叔戊酸异丁酯	1027	1063	1157	1093	1090	1142	1169	936	971	993	1031	945	971
叔戊酸异戊酯	1119	1159	1252	1182	1181	1248	1270	1030	1067	1087	1139	1038	1066

表 14-50　丙烯酸酯与丙炔酸酯保留指数[48]

柱温：100℃

I　　固定液 化合物	角鲨烷	OV-101	SE-54	Ucon LB 550X	SP 1000
丙烯酸甲酯	596.5	596.7	603.9	719.5	940.0
丙烯酸乙酯	654.0	675.7	700.0	793.2	992.1
丙烯酸丙酯	733.2	775.0	797.2	884.6	1078.3
丙烯酸丁酯	835.2	875.2	895.1	983.3	1175.2
丙烯酸戊酯	934.8	974.8	994.9	1082.7	1272.9
丙烯酸己酯	1033.6	1075.2	1095.3	1181.6	1370.3
丙烯酸异丙酯	684.4	722.5	739.3	820.9	995.9
丙烯酸异丁酯	794.5	835.5	854.7	936.0	1113.8
丙烯酸异戊酯	899.8	939.0	958.8	1041.7	1223.2
丙烯酸异己酯	992.7	1035.4	1054.5	1132.8	1311.4
丙炔酸甲酯	611.0	615.0	628.7	715.3	904.6
丙炔酸乙酯	669.0	694.9	708.3	786.2	954.4
丙炔酸丙酯	748.1	794.1	807.2	880.1	1041.7
丙炔酸丁酯	841.9	892.2	905.5	979.0	1138.3
丙炔酸戊酯	944.3	989.5	1005.4	1078.2	1236.1
丙炔酸己酯	1042.3	1086.5	1105.1	1176.9	1332.6
丙炔酸异丙酯	688.1	739.4	750.2	814.0	956.0
丙炔酸异丁酯	807.5	854.3	866.4	932.8	1079.2
丙炔酸异戊酯	910.8	954.6	968.2	1037.2	1186.4
2-氯丙炔酸甲酯	711.3	766.[illegible]	793.2	922.2	1197.8
2-氯丙炔酸乙酯	789.3	847.8	873.7	978.8	1226.5
2-氯丙炔酸丙酯	878.2	932.[illegible]	958.5	1067.7	1303.9
2-氯丙炔酸丁酯	975.3	1029.0	1055.2	1161.9	1390.6
2-氯丙炔酸戊酯	1072.7	1126.4	1152.9	1257.5	1483.5
2-氯丙炔酸己酯	1172.2	1225.1	1252.1	1356.2	1577.4
2-氯丙炔酸异丙酯	820.5	875.6	899.0	997.1	1216.5
2-氯丙炔酸异丁酯	937.2	989.1	1014.2	1114.0	1335.9
2-氯丙炔酸异戊酯	1039.5	1090.0	1116.9	1218.1	1440.6
3-氯丙炔酸甲酯	770.0	823.0	855.2	1007.7	1331.7
3-氯丙炔酸乙酯	846.7	901.4	930.9	1071.5	1371.6
3-氯丙炔酸丙酯	944.4	1000.1	1029.6	1164.0	1454.2
3-氯丙炔酸丁酯	1042.7	1098.5	1127.8	1260.3	1544.5
3-氯丙炔酸戊酯	1140.7	1195.8	1226.6	1358.3	1638.7
3-氯丙炔酸己酯	1239.3	1294.3	1326.1	1456.7	1734.7
3-氯丙炔酸异丙酯	888.2	945.0	971.5	1095.9	1366.2
3-氯丙炔酸异丁酯	1004.7	1059.6	1088.0	1213.0	1488.7
3-氯丙炔酸异戊酯	1105.6	1160.1	1189.6	1316.8	1591.6
2,3-二氯丙炔酸甲酯	869.1	923.6	960.1	1130.8	1490.7
2,3-二氯丙炔酸乙酯	940.8	994.5	1028.0	1182.5	1512.1
2,3-二氯丙炔酸丙酯	1036.1	1088.7	1122.6	1269.6	1585.4
2,3-二氯丙炔酸丁酯	1131.5	1183.7	1218.4	1361.4	1669.0
2,3-二氯丙炔酸戊酯	1227.5	1279.8	1314.4	1457.3	1761.4
2,3-二氯丙炔酸己酯	—	1378.1	1412.7	1554.8	—
2,3-二氯丙炔酸异丙酯	977.2	1032.0	1055.4	1198.6	1494.1

续表

I 固定液 / 化合物	角鲨烷	OV-101	SE-54	Ucon LB 550X	SP-1000
2,3-二氯丙炔酸异丁酯	1095.9	1145.3	1176.4	1315.5	1614.8
2,3-二氯丙炔酸异戊酯	1193.0	1243.0	1275.3	1414.6	1713.7
2,3 二氯丙炔酸异己酯		—	1365.9	1499.0	—
2-溴丙炔酸甲酯	788.3	837.8	868.3	1000.0	1299.7
2-溴丙炔酸乙酯	858.1	909.1	937.4	1056.1	1326.9
2-溴丙炔酸丙酯	953.5	1004.6	1032.6	1145.8	1405.3
2 溴丙炔酸丁酯	1050.4	1101.7	1129.2	1239.7	1493.5
2-溴丙炔酸戊酯	1146.6	1198.5	1226.0	1335.7	1583.5
2-溴丙炔酸己酯	1245.8	1298.1	1325.7	1435.2	1681.1
2 溴丙炔酸异丙酯	896.4	947.4	972.2	1075.3	1316.4
2 溴丙炔酸异丁酯	1016.3	1062.8	1088.5	1192.6	1438.3
2 溴丙炔酸异戊酯	1115.1	1162.9	1188.7	1292.2	1539.6
3-溴丙炔酸甲酯	852.4	901.7	937.1	1099.7	1435.2
3 溴丙炔酸乙酯	928.3	978.5	1012.7	1160.0	1474.2
3-溴丙炔酸丙酯	1026.9	1076.9	1110.9	1251.3	1553.8
3 溴丙炔酸丁酯	1126.0	1175.3	1209.2	1346.9	1645.5
3-溴丙炔酸戊酯	1223.7	1273.0	1307.3	1444.9	1739.7
3 溴丙炔酸己酯	1322.3	1373.2	1406.9	1545.2	
3 溴丙炔酸异丙酯	970.0	1021.1	1051.8	1183.6	1465.9
3 溴丙炔酸异丁酯	1087.4	1135.5	1168.0	1300.0	1586.0
3 溴丙炔酸异戊酯	1188.9	1235.9	1269.1	1396.7	1687.1
3-溴丙炔酸异己酯	1281.6	1330.4	1363.4	1493.0	1776.0
2,3-二溴丙炔酸甲酯	1022.5	1070.1	1110.8	1288.0	—
2,3 二溴丙炔酸乙酯	1094.9	1139.7	1179.8	1341.9	—
2,3-二溴丙炔酸丙酯	1171.4	1233.5	1272.3	1426.7	—
2,3-二溴丙炔酸丁酯	1268.4	1327.1	1366.2	1516.0	—
2,3-二溴丙炔酸戊酯	—	1423.2	1461.3	1609.8	—
2,3-二溴丙炔酸己酯	—	1521.0	1559.9	1707.5	—
2,3-二溴丙炔酸异丙酯	1133.3	1174.3	1210.4	1355.1	—
2,3-二溴丙炔酸异丁酯	1248.5	1288.0	1326.1	1469.5	—
2,3-二溴丙炔酸异戊酯	—	1383.8	1422.8	1565.2	—
2,3 二溴丙炔酸异己酯	—	1474.1	1512.4	1649.2	—
3-溴-2-氯丙炔酸甲酯	—	1024.5	1031.6	1203.1	—
3-溴-2 氯丙炔酸乙酯	—	1070.1	1099.6	1254.4	—
3-溴-2-氯丙炔酸丙酯	—	1158.5	1194.4	1342.3	—
3-溴-2-氯丙炔酸丁酯	—	1252.9	1288.4	1433.3	—
3-溴-2-氯丙炔酸戊酯	—	1348.9	1383.6	1527.8	—
3 溴 2-氯丙炔酸己酯	—	·	1481.1	1624.8	—
3 溴 2 氯丙炔酸异丙酯	—	1100.7	1133.4	1270.0	—
3 溴 2 氯丙炔酸异丁酯	—	1214.2	1249.1	1387.6	—
3-溴-2-氯丙炔酸异戊酯	—	1311.1	1345.1	1484.9	—
3-溴-2 氯丙炔酸异己酯	·	1400.5	1435.3	1568.0	—

表 14-51　丁烯酸酯与丁酸酯保留指数[9]

柱温：150℃

I 固定液 / 化合物	Gensil S_{2116}	OV-1	OV-17	苯基(85%)甲基聚硅氧烷	OV 210	XF 1150
2-甲基-2-丙烯酸甲酯	659	677	829	869	900	1046
2-甲基-2-丙烯酸乙酯	742	756	863	935	969	1102
2-甲基-2-丙烯酸丙酯	851	856	957	1029	1075	1200
2-甲基-2-丙烯酸丁酯	947	962	1068	1119	1175	1297
2-甲基-2-丙烯酸戊酯	1068	1064	1176	1217	1280	1401
2-甲基-2-丙烯酸己酯	1174	1165	1281	1319	1379	1509
2-甲基-2-丙烯酸辛酯	1389	—	1463	1520	1578	1702
2-甲基-2-丙烯酸异丙酯	776	—	—	935	995	1114
2-甲基-2-丙烯酸异丁酯	912	928	1032	1074	1145	1251
2-甲基-2-丙烯酸异戊酯	1031	—	1126	1160	1247	1354
2-丁烯酸甲酯	732	—	—	959	1009	1170
2-丁烯酸乙酯	81[illegible]	820	965	1021	1080	1230
2-丁烯酸丙酯	929	917	1065	1109	1190	1329
2-丁烯酸丁酯	1033	1021	1157	1217	1286	1433
2-丁烯酸戊酯	1142	1119	1265	1306	1834	1545
2-丁烯酸己酯	1245	—	—	1407	1479	1641
2-丁烯酸辛酯	1458	—	—	1580	1672	1838
2-丁烯酸异丙酯	858	863	978	1022	1104	1232
2-丁烯酸异丁酯	985	983	1094	1138	1251	1373
2-丁烯酸异戊酯	1100	1082	1208	1251	1353	1496
3-丁烯酸甲酯	658	693	801	872	927	1100
3-丁烯酸乙酯	742	767	871	940	1006	1159
3-丁烯酸丙酯	848	864	971	1040	1106	1259
3-丁烯酸丁酯	964	967	1072	1141	1211	1391
3-丁烯酸戊酯	1069	1065	1173	1239	1310	1448
3-丁烯酸己酯	1171	1160	1271	1332	1420	1548
3-丁烯酸辛酯	1390	1357	1169	1520	1614	1740
3-丁烯酸异丙酯	773	800	900	963	1025	1160
3-丁烯酸异丁酯	914	926	1023	1075	1160	1300
3-丁烯酸异戊酯	1028	1050	1133	1190	1256	1400
丁酸甲酯	671	711	811	845	902	1043
丁酸乙酯	761	788	887	926	992	1108
丁酸丙酯	873	884	987	1020	1096	1215
丁酸丁酯	983	980	1081	1122	1193	1313
丁酸戊酯	1091	1075	1182	1205	1290	1418
丁酸己酯	1202	—	1281	1297	1388	1520
丁酸辛酯	1415	—	1475	1492	1576	1715
丁酸异丙酯	796	823	915	953	1036	1108
丁酸异丁酯	934	937	1036	1257	1168	1262
丁酸异戊酯	1047	1039	1140	1172	1261	1350
异丁酸甲酯	627	669	—	796	882	963
异丁酸乙酯	705	738	838	878	951	1032
异丁酸丙酯	817	836	926	959	1060	1131
异丁酸丁酯	928	933	1024	1058	1152	1235
异丁酸戊酯	1033	1032	1125	1117	1248	1340
异丁酸己酯	1142	—	1220	1246	1345	1443
异丁酸辛酯	1353	—	1416	1430	1543	1642
异丁酸异丙酯	730	785	850	878	973	1031
异丁酸异丁酯	885	900	980	1000	1104	1192
异丁酸异戊酯	998	998	1080	1100	1221	1299

表 14-52 不饱和酸酯保留指数[6]

柱温：150℃

化合物 \ I \ 固定液	SE-30	OV-17	OV-25	XE-60	化合物 \ I \ 固定液	SE-30	OV-17	OV-25	XE-60
丙烯酸甲酯	569	743	796	844	丙酸乙烯酯	648	763	790	861
丙烯酸乙酯	664	781	831	911	丁酸乙烯酯	750	859	892	963
丙烯酸丙酯	—	887	939	1006	戊酸乙烯酯	—	950	990	1060
丙烯酸丁酯	878	987	1040	1111	己酸乙烯酯	—	1037	1095	1162
丙烯酸戊酯	979	1108	1142	1210	异丁酸乙烯酯	—	773	857	912
丙烯酸己酯	1068	1200	1240	1312	3-甲基丁酸乙烯酯		889	928	996
丙烯酸异丙酯	—	816	865	914	4-甲基戊酸乙烯酯	-	998	1250	1118
丙烯酸 2-甲基丙基酯	—	953	986	1055	甲酸烯丙酯	571	714	743	844
甲基丙烯酸甲酯	677	829	865	909	乙酸烯丙酯	670	801	831	892
甲基丙烯酸乙酯	756	863	920	980	丙酸烯丙酯	770	895	933	995
甲基丙烯酸丙酯	856	957	1016	1085	丁酸烯丙酯	853	990	1020	1096
甲基丙烯酸丁酯	962	1068	1118	1179	戊酸烯丙酯	960	1090	1123	1192
甲基丙烯酸戊酯	1064	1176	1214	1274	己酸烯丙酯	1056	1192	1219	1294
甲基丙烯酸己酯	1165	1281	1312	1369	辛酸烯丙酯	—	—	—	1490
甲基丙烯酸辛酯	—	1463	1489	—	异丁酸烯丙酯	815	916	961	1041
甲基丙烯酸(2-甲基丙)酯	928	1032	1060	1128	3-甲基丁酸烯丙酯	915	1032	1065	1130
甲基丙烯酸(3-甲基丁)酯	—	1416	1439	—	4-甲基戊酸烯丙酯		—	1181	1240
丁烯酸乙酯	820	965	1016	1086	乙酸异丙酯	644	744	782	815
丁烯酸丙酯	917	1065	1112	1188	丙酸异丙酯	—	846	891	921
丁烯酸丁酯	1021	1157	1210	1272	丁酸异丙酯	—	944	988	1012
丁烯酸异丙酯	863	978	1015	1090	戊酸异丙酯	—	1036	1095	1022
丁烯酸戊酯	1119	1265	1307	1372	己酸异丙酯	—	1138	1189	—
丁烯酸(3-甲基丙)酯	983	1091	1156	1232	异丁酸异丙酯	—	875	928	988
丁烯酸(3-甲基丁)酯	1082	1208	1257	1332	3-甲基丁酸异丙酯	—	—	1029	1084
乙烯酸乙烯酯	548	679	688	770	4-甲基戊酸异丙酯	—	1092	1144	1184

表 14-53 邻苯二甲酸酯保留指数[29]

固定液	SE-30	OV-101	固定液	SE-30	OV-101
化合物 \ I \ 柱温/℃	250	230	化合物 \ I \ 柱温/℃	250	230
邻苯二甲酸二甲酯	—	1453	邻苯二甲酸二环己基酯	2475	—
邻苯二甲酸二乙酯	1583	1581	邻苯二甲酸二环庚基酯	2735	—
邻苯二甲酸二正丙酯	1758	1756	邻苯二甲酸甲基-正十一基酯	2389	—
邻苯二甲酸二正丁酯	1940	1937	邻苯二甲酸乙基-正癸基酯	2343	—
邻苯二甲酸二正戊酯	2122	2120	邻苯二甲酸正丙基-正壬基酯	2325	—
邻苯二甲酸二正己酯	2308	2305	邻苯二甲酸正丁基-正辛基酯	2317	—
邻苯二甲酸二正庚酯	2497	2494	邻苯二甲酸正戊基-正庚基酯	2310	—
邻苯二甲酸二正辛酯	2685	—	邻苯二甲酸正己基-正庚基酯	2404	—
邻苯二甲酸二正壬酯	2876	—	邻苯二甲酸正丁基-正壬基酯	2415	—
邻苯二甲酸二正癸酯	3067	—	邻苯二甲酸正戊基-正癸基酯	2602	—
邻苯二甲酸二(2-乙基己基)酯	2509	—			

表 14-54 间苯二甲酸酯保留指数[29]

固定液	SE-30		OV-101	固定液	SE 30		OV-101
I 柱温/℃ 化合物	250	251	230	I 柱温/℃ 化合物	250	251	230
间苯二甲酸二甲酯	--	—	1512	间苯二甲酸二王辛酯	·		—
间苯二甲酸二乙酯		1639	1638	间苯二甲酸甲基正十一基酯	2459	–	
间苯二甲酸二正丙酯	—	1829	1828	间苯二甲酸乙基正癸基酯	2423	- -	
间苯二甲酸二正丁酯	—	2030	2025	间苯二甲酸正丙基正壬基酯	2419	--	—
间苯二甲酸二正戊酯	—	2222	2219	间苯二甲酸正丁基正辛基酯	2419	--	—
间苯二甲酸二正己酯		2417	2414	间苯二甲酸正戊基正庚基酯	2416		
间苯二甲酸二正庚酯	—	2608	2605	间苯二甲酸二正己基酯	2417	—	—

表 14-55 对苯二甲酸酯保留指数[29]

固定液	SE-30		OV-101	固定液	SE 30		OV-101
I 柱温/℃ 化合物	250	251	230	I 柱温/℃ 化合物	250	251	230
对苯二甲酸二甲酯	—	—	1530	对苯二甲酸二王辛酯	—	—	2860
对苯二甲酸二乙酯	—	1650	1649	对苯二甲酸甲基正十一基酯	2483	—	—
对苯二甲酸二正丙酯	—	1851	1850	对苯二甲酸乙基-正癸基酯	2455	-	
对苯二甲酸二正丁酯		2060	2058	对苯二甲酸正丙基-正壬基酯	2459	—	—
对苯二甲酸二正戊酯		2261	2258	对苯二甲酸正丁基-正辛基酯	2465	—	—
对苯二甲酸二正己酯		2463	2460	对苯二甲酸正戊基正庚基酯	2466	—	—
对苯二甲酸二正庚酯	—	2665	2661	对苯二甲酸二正己基酯	2469	–	—

表 14-56 二脂肪酸酯保留指数[53]

固定液：聚甲基硅氧烷

柱温/℃	75		100		125		150		175		200	
保留指数 化合物	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$
I	890.9	−0.15	887.3	−0.14	884.0	−0.11	881.5	−0.09	—	--		-
II	999.3	−0.12	997.1	−0.09	995.2	−0.07	993.7	−0.04	—	—	—	—
III	1103.5	0.09	1101.7	−0.06	1099.7	−0.04	1098.8	−0.03			--	—
IV	—	—	1206.9	−0.08	1205.4	−0.07	1203.8	−0.05	1201.8	−0.04	—	
V		—	1309.6	−0.07	1308.0	−0.04	1307.1	0.02	1306.7	−0.01	—	—
VI	—	—	1411.7	−0.05	1410.3	0.03	1409.6	−0.01	1409.5	—	—	—
VII	—	--		—	1511.6	−0.01	1511.0	—	1511.1	—	1511.6	
VIII	—	—	—	—	1613.4		1612.7	--	1612.9	—	1613.5	—
IX	—	—	—	—	1713.5		1713.2	—	1713.6	—	1711.0	
XI	983.9	−0.08	980.9	−0.06	979.3	−0.05	978.3	−0.09				—
XII	994.0	−0.05	993.2	0.02	992.8	−0.01	992.9	−0.04	—	—	—	—
XIII	1059.3	−0.07	1057.7	−0.06	1056.4	−0.04	1055.4	−0.03	—	—	—	
XIV	1085.1	−0.01	1084.8	−0.01	1084.6	—	1084.7	−0.0	—	—	—	
XV	1064.8	−0.10	1061.4	−0.08	1059.0	0.07	1056.8	−0.08	—	—	—	—
XVI	--		--	—	1358.8	+0.22	1365.2	+0.27	1372.7	+0.32	1381.1	+0.33
XVII	—	—	—	—	1424.2	+0.18	1429.3	+0.22	1435.7	+0.27	1442.2	+0.33
XVIII			--	—	1521.8	−0.30	1530.1	+0.36	1539.6	+0.41	1550.4	+0.45
XIX	--			-	1358.9	−0.27	1366.3	+0.31	1374.6	+0.35	1381.0	+0.12
XX		—	—	—	1403.1	+0.26	1410.0	+0.30	1417.8	+0.34	1427.0	+0.40

续表

柱温/°C	75		100		125		150		175		200	
化合物 \ 保留指数	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$	I	$\frac{\partial I}{\partial T}$
XXI	—	—	—	—	1413.0	+0.35	1422.7	+0.40	1433.8	+0.43	1444.9	+0.49
XXII		—	—	—	1409.3	+0.34	1417.9	+0.36	1426.8	+0.41	1437.2	+0.47
XXIII	—	—	—	—	1470.3	+0.36	1479.4	+0.39	1488.5	+0.41	1498.8	+0.44
XXIV		—	—	—	1461.1	+0.36	1470.5	+0.41	1480.5	+0.45	1492.1	+0.49

① 表中化合物：

$CH_3OOC(CH_2)_nCOOCH_3$

I　$n=1$

II　$n=2$

III　$n=3$

⋮　　⋮

IX　$n=9$

$CH_3COOCH{=}C(R){-}COOCH_3$

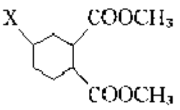
XI　R=H(顺)

XII　R=H(反)

XIII　$R=CH_3$(顺)

XIV　$R=CH_3$(反)

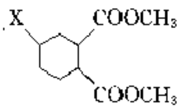
XV　异构　$CH_3COOCH_2C(=CH_2)COOCH_3$



XVI　X=H

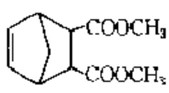
XVII　$X=CH_3$

XVIII　X=Cl



XIX　X=H

XX　$X=CH_3$



XXI

XXII——邻苯二甲酸二甲酯

XXIII——间苯二甲酸二甲酯

XXIV——对苯二甲酸二甲酯

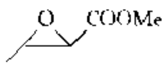
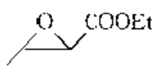
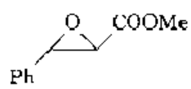
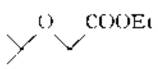
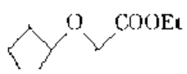
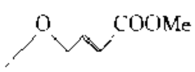
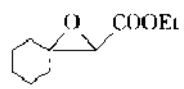
表 14-57　单烷基甘油酯保留指数①[38]

固定液：OV-1　　柱温：230℃

化合物	I	化合物	I
1-十六烯酸甘油酯	2355	1-十八烯酸甘油酯	2552
1-十六酸甘油酯	2373	1-十八酸甘油酯	2572
1-十七酸甘油酯	2478		

表 14-58　缩水甘油酸酯保留指数[55]

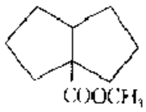
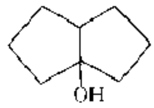
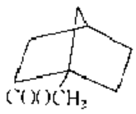
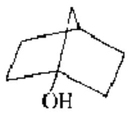
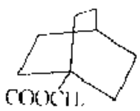
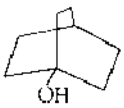
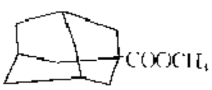
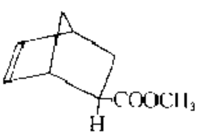
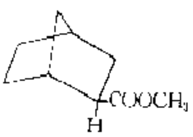
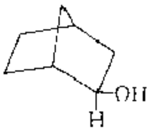
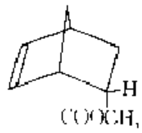
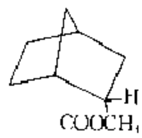
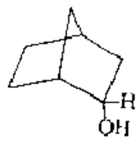
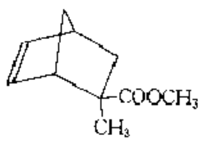
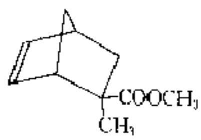
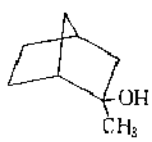
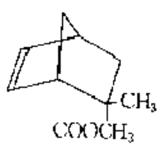
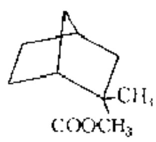
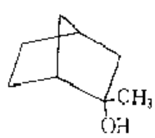
固定液：Ucon LB 550X

化合物 \ I \ 柱温/°C	140	160	180	200	220	240	化合物 \ I \ 柱温/°C	140	160	180	200	220	240
	878	873	875	877				—	1142	1132	1141	1128	1142
	—	924	926	930	919	920		—	—	1453	1462	1467	1483
	—	956	948	955	948	942			1257	1260	1267	1268	1283
	—	1111	1103	1105	1100	1128		—	1352	1360	1370	1375	1390

①Me——甲基；Et——乙基；Ph——苯基。

表 14-59　环甲酯与环醇保留指数[123]

柱温：140℃

固定液 / I / 化合物	SE 30	PEG-20M	EGSSX
	1200	1544	1720
	1310	1660	—
	1120	1487	1677
	942	1495	1669
	1247	1631	1804
	1061	1858	1775
	1431	1831	2031
	1253	1831	2031
	1098	1493	1693
	1135	1512	1702
		1544	1704
	1103	1527	1735
	1131	1507	1694
		1558	1711
	1130	1480	1650
	1156	1488	1649
	998	1471	1635
	1125	1493	1676
	1174	1511	1676
	999	1496	1636

续表

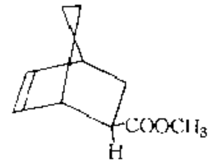
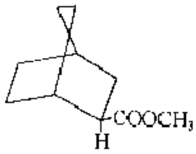
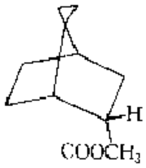
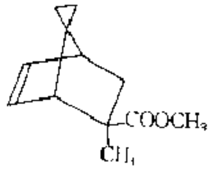
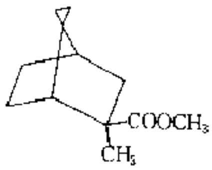
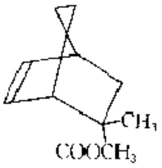
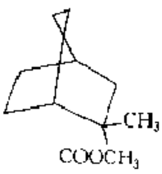
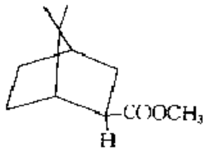
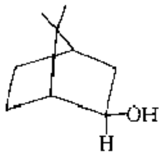
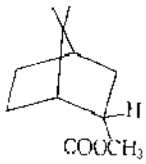
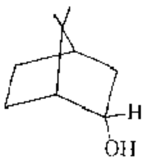
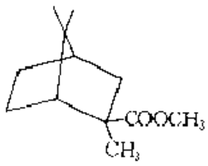
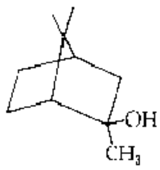
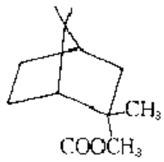
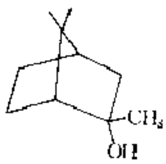
固定液 I 化合物	SE-30	PEG-20M	EGSSX
	1230	1643	1839
	1262	1639	1822
	1245	1685	1896
	1268	1643	1820
	1254	1614	1789
	1291	1623	1790
	1270	1658	1846
	1295	1631	1800
	1268	1635	1809
	–	1667	1800
	1265	1620	1801
	--	1687	1830
	1302	1624	1783
	1133	1574	1719
	1303	1624	1784
	1146	1600	1755

表 14-60 芳香酯保留指数[42]

柱温：200℃

化合物 \ I \ 固定液	SE-30	OV-25	QF-1	Silar-10C
苯甲酸甲酯	1101	1380	1596	2200
苯甲酸乙酯	1171	1440	1559	2233
苯甲酸丙酯	1268	1533	1629	2319
苯甲酸丁酯	1365	1630	1738	2415
丙酸苯酯	1151	1429	1579	2328
丁酸苯酯	1245	1512	1659	2395
戊酸苯酯	1343	1611	1748	2492
己酸苯酯	1440	1709	1862	2584
异丁酸苯酯	1196	1419	1606	2285
异戊酸苯酯	1293	1551	1696	2400
苯乙酸甲酯	1170	1480	1562	2381
苯乙酸乙酯	1229	1530	1607	2394
苯乙酸丙酯	1325	1620	1693	2457
苯乙酸丁酯	1420	1710	1788	2540
苯乙酸戊酯	1516	1807	1882	2626
苯乙酸己酯	1610	1896	1976	2713
苯乙酸异丙酯	1266	1536	1633	2315
苯乙酸异丁酯	1378	1652	1744	2462
苯乙酸异戊酯	1477	1756	1853	2565
乙酸苯甲酯	1154	1450	1567	2330
丙酸苯甲酯	1245	1537	1620	2380
丁酸苯甲酯	1337	1622	1700	2442
己酸苯甲酯	1531	1807	1893	2618
异丁酸苯甲酯	1288	1557	1636	2330
异戊酸苯甲酯	1382	1651	1745	2437

表 14-61 苯甲酸酯保留指数（一）[54]

固定液：SE-30

化合物 \ I \ 柱温/℃	140	160	180	200	220	240
苯甲酸苄酯	1712	1725	1741	1756	1771	1789
苯甲酸-(±)-1-苯乙基酯	1733	1744	1760	1771	1784	1796
苯甲酸-2-苯乙基酯	1796	1809	1825	1836	1849	1863
2-氯苯甲酸苄酯	1867	1883	1900	1914	1929	1944
2-氯苯甲酸-(±)-1-苯乙基酯	1882	1897	1919	1924	1937	1949
2-氯苯甲酸-2-苯乙基酯	1953	1969	1989	2006	2020	2037
3-氯苯甲酸苄酯	1866	1880	1897	1912	1926	1942
3-氯苯甲酸-(±)-1-苯乙基酯	1880	1894	1910	1923	1936	1949
3-氯苯甲酸-2-苯乙基酯	1945	1962	1978	1993	2007	2021
4-氯苯甲酸苄酯	1866	1881	1899	1914	1928	1944
4-氯苯甲酸-(±)-1-苯乙基酯	1881	1895	1911	1925	1938	1952
4-氯苯甲酸-2-苯乙基酯	1950	1966	1985	2000	2017	2034
五氟苯甲酸苄酯	1573	1578	1583	1589	—	
五氟苯甲酸-(±)-1-苯乙基酯	1594	1597	1601	1605	—	—
五氟苯甲酸-2-苯乙基酯	1662	1667	1674	1680	—	—
4-硝基苯甲酸苄酯	—	2071	2087	2106	2121	2141
4-硝基苯甲酸-(±)-1-苯乙基酯	—	2084	2103	2119	2137	2155
4-硝基苯甲酸-2-苯乙基酯	—	2156	2169	2189	2211	2230
3,5-二硝基苯甲酸苄酯	—	2309	2325	2342	2357	2377
3,5-二硝基苯甲酸-(±)-1-苯乙基酯	—	2310	2327	2344	2358	2377
3,5-二硝基苯甲酸-2-苯乙基酯	—	2383	2399	2420	2439	2460

表 14-62 苯甲酸酯保留指数（二）[54]

固定液：OV-351

化合物 \ I \ 柱温/℃	160	180	200	220
苯甲酸苄酯	2547	2576	2607	2636
苯甲酸-(±)-1-苯乙基酯	2504	2530	2558	2583
苯甲酸-2-苯乙基酯	2621	2652	2682	2712
2-氯苯甲酸苄酯	2799	2833	2869	2905
2-氯苯甲酸-(±)-1-苯乙基酯	2760	2786	2814	2839
2-氯苯甲酸-2-苯乙基酯	2894	2927	2959	2994
3-氯苯甲酸苄酯	2737	2768	2797	2831
3-氯苯甲酸-(±)-1-苯乙基酯	2692	2717	2745	2771
3-氯苯甲酸-2-苯乙基酯	2810	2841	2873	2905
4-氯苯甲酸苄酯	2740	2772	2801	2832
4-氯苯甲酸-(±)-1-苯乙基酯	2699	2723	2749	2773
4-氯苯甲酸-2-苯乙基酯	2814	2844	2875	2906
五氟苯甲酸苄酯	2172	2180	2191	2200
五氟苯甲酸-(±)-1-苯乙基酯	2130	2149	2170	2190
五氟苯甲酸-2-苯乙基酯	2259	2265	2271	2276

表 14-63 甲氧基苯甲酸甲酯保留指数[13]

柱温：195℃

化合物 \ 固定液 I	Apiezon L	邻甲氧基苯甲酸对十二烷基苯基酯	间甲氧基苯甲酸对十二烷基苯基酯	对甲氧基苯甲酸对十二烷基苯基酯
苯	685	773	715	732
苯甲醚	957	1067	989	1006
苯甲酸甲酯	1093	1349	1282	1296
邻甲氧基苯甲酸甲酯	1451	1686	1577	1581
间甲氧基苯甲酸甲酯	1419	1622	1555	1545
对甲氧基苯甲酸甲酯	1482	1687	1606	1650

表 14-64 甲苯甲酸甲酯保留指数[10]

柱温：174℃

化合物 \ 固定液 I	聚乙烯	苯甲酸对十一烷基苯基酯	邻甲苯甲酸对十一烷基苯基酯	间甲苯甲酸对十一烷基苯基酯	对甲苯甲酸对十一烷基苯基酯
苯	703	750	748	746	746
甲苯	820	858	856	855	855
苯甲酸甲酯	1119	1223	1214	1219	1220
邻甲苯甲酸甲酯	1203	1299	1294	1293	1298
间甲苯甲酸甲酯	1230	1336	1331	1330	1331
对甲苯甲酸甲酯	1238	1343	1342	1340	1343

第三节 酮、醛与醚的保留指数

表 14-65 酯和酮保留指数[13]

柱温：150℃

化合物 \ 固定液 I	SE-30	OV-7	DC-710	100%苯基硅油	DC-230	DC-530	XE 60	F 400	F 500	OV-225	QF-1	Silar 5CP	XF 1150
乙酸甲酯	509	559	609	732	519	569	737	617	672	759	772	850	894
乙酸乙酯	592	648	690	803	599	642	815	687	742	835	855	923	927
乙酸丙酯	695	755	796	895	704	747	920	796	845	932	960	1013	1040
乙酸丁酯	794	855	895	991	810	846	1022	899	945	1030	1064	1116	1135
乙酸戊酯	891	958	996	1081	914	942	1122	999	1045	1132	1169	1212	1227
乙酸己酯	988	1056	1092	1174	1012	1040	1221	1098	1143	1229	1267	1303	1313
2-丙酮	459	538	574	729	499	672	773	626	672	798	813	907	946
2-丁酮	569	652	690	825	608	770	883	727	770	897	903	994	1043
2-戊酮	673	746	786	889	706	858	971	817	858	984	1006	1078	1131
2-己酮	778	848	892	1002	811	969	1080	926	969	1081	1116	1187	1237
2-庚酮	875	949	988	1094	913	1068	1178	1039	1068	1179	1219	1288	1341
2-辛酮	977	1048	1086	1191	1010	1169	1276	1128	1169	1273	1321	1388	1441
丙酮酸甲酯	701	807	873	994	739	948	1125	873	948	1129	1142	1288	1360
丙酮酸乙酯	774	882	941	1057	815	1029	1181	956	1029	1182	1216	1341	1407
丙酮酸丙酯	870	971	1028	1135	906	1112	1265	1039	1112	1265	1308	1425	1497
丙酮酸丁酯	968	1066	1120	1227	1003	1207	1359	1132	1207	1358	1409	1521	1589
丙酮酸戊酯	1067	1162	1212	1319	1100	1305	1455	1228	1305	1451	1508	1617	1688
丙酮酸己酯	1164	1258	1304	—	1194	—	—	—	—	—	—	1711	1784
2,3-丁二酮	555	642	690	843	586	744	900	699	744	902	903	1005	1067
2,3-戊二酮	667	749	798	—	702	848	993	800	848	1002	1002	1118	1169
2,3-己二酮	764	839	885	959	795	941	1076	889	941	1075	1092	1194	1255
2,3-辛二酮	968	1041	1085	1178	1004	1142	1276	1086	1142	1273	1304	1395	1454
2,4-戊二酮	779	874	931	1068	819	998	1186	933	998	1177	1163	1340	1415
2,5-己二酮	906	1037	1110	1286	966	1201	1366	1117	1201	1370	1456	1600	1641
3,5-庚二酮	977	1064	1113	1224	1015	1181	1423	1115	1181	1413	1338	1589	1591
4,4-壬二酮	1152	1228	1268	1377	1183	1341	1509	1275	1341	1485	1493	1647	1720

表 14-66 C_3～C_{10}酮保留指数[5]

固定液	Apiezon M		邻苯二甲酸二壬酯		聚己二酸乙二醇酯		β,β'-氧二丙腈
I 柱温/℃ 化合物	50	125	50	125	50	125	50
丙酮	484	583	898	480	606	856	1121
丁酮	581	688	981	578	691	930	1193
戊酮	670	776	1059	667	778	1005	1254
己酮	77[illegible]	883	1159	767	878	1104	1316
庚酮	871	983	1259	867	979	1198	1420
辛酮	971	1083	1359				
壬酮	107[illegible]	1183	1458	—	—	—	—
癸酮	127[illegible]	1383	1655	—	—	—	—

表 14-67 萘满酮与香豆素保留指数[6]

柱温：170℃

I 固定液 化合物	OV-17	Apiezon L	I 固定液 化合物	OV-17	Apiezon L
环己烷	757	—	α-萘满酮	1645	1458
甲基环己烷	793	-	2-甲基-1-萘满酮	1667	1492
苯	774	—	1-甲基-2-萘满酮	1669	1479
甲苯	887	—	二氢香豆素	1682	1431
环己酮	1080		4-甲基-1-萘满酮	1688	1514
甲氧基苯	1085	-	香豆素	1758	1521
四氢-4H-吡喃-4-酮	1088		6-甲基香豆素	1863	1638
δ-戊内酯	1107	—	7-甲氧基-1-萘满酮	1897	1666
2-甲基环己酮	1119	—	7-甲氧基-2-萘满酮	1903	1680
4-甲基环己酮	1144	—	5-甲氧基-1-萘满酮	1905	1690
3-甲基环己酮	1155		6-甲氧基-2-萘满酮	1910	1711
四氢萘	1318	—	6-甲氧基-1-萘满酮	1970	1820
2-香豆满酮	1501	1289	7-甲氧基香豆素	2056	1798
1-色满酮	1621	1390	4-甲氧基香豆素	2085	1844
β-萘满酮	1625	1503	7-甲氧基-4-甲基香豆素	2214	2021

表 14-68 吡啶并[1，2α]嘧啶-4-酮衍生物保留指数[12]

柱温：220℃

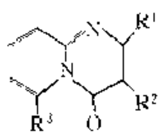
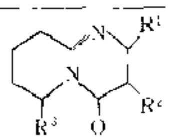
I 固定液 化合物	R^1	R^2	R^3	OV-1	OV-17	OV-25
	H	H	H	1577.4	1596.2	2124
	CH_3	H	H	1618.2	2038.5	2189
	H	H	CH_3	1636.4	1993.6	2150
	H	CH_3	H	1638.1	2004.0	2161
	CH_3	H	CH_3	1707.3	2056.7	2214
	H	CH_3	CH_3	1694.2	2040.5	2198
	CH_3	H	C_2H_5	1751.0	2087.9	2215
	C_2H_5	H	CH_3	1787.9	2137.9	2292
	H	C_2H_5	CH_3	1766.0	2101.1	2255
	CH_3	C_2H_5	CH_3	1821.3	2145.4	2297
	C_2H_5	CH_3	CH_3	1839.2	2170.6	2325
	CH_3	C_3H_7	H	1853.5	2199.2	2358
	CH_3	C_3H_7	CH_3	1895.6	2219.7	2374
	H	H	H	1581.4	1964.8	2128
	H	H	CH_3	1578.2	1931.4	2081
	CH_3	H	CH_3	1656.1	2008.5	2159
	H	CH_3	CH_3	1636.3	1976.3	2121
	CH_3	C_2H_5	CH_3	1753.1	2088.2	2211

表 14-69　C_2～C_{10}醛保留指数[1]

固定液	Apiezon M		邻苯二甲酸二壬酯		聚己二酸乙二醇酯		β,β′氧二丙腈
柱温/℃ / I / 化合物	50	125	50	125	50	125	50
乙醛	387	473	770	377	468	730	968
丙醛	482	582	859	482	602	816	1057
丁醛	579	681	947	577	683	898	1136
戊醛	686	788	1054	679	785	998	1228
己醛	788	892	1156	780	886	1097	1313
庚醛	888	995	1257	880	986	1194	1395
辛醛	988	1097	1357	—			—
壬醛	1089	1197	1457	—	—	—	—
癸醛	1189	1295	1555	—		—	—

表 14-70　醛与酮的保留指数（一）[30]

柱温：150℃

固定液 / I / 化合物	XF-1150	OV-105	OV-225	Silar 5CP	Silar 7CP	Silar 9CP	Silar 10C	OV-275
甲醛	825	898	655	697	882	983	1041	1027
乙醛	820	820	624	775	871	913	951	989
丙醛	921	933	761	878	975	1040	1084	1075
丁醛	1030	1040	869	966	1076	1140	1179	1175
戊醛	1150	1155	978	1075	1189	1255	1290	1292
己醛	1259	1261	1086	1182	1297	1365	1405	1388
庚醛	1357	1364	1188	1289	1401	1466	1504	1483
丙酮	966	977	786	854	995	1090	1137	1116
甲乙酮	1062	1072	890	995	1115	1188	1233	1217
甲丙酮	1149	1156	978	1077	1198	1212	1330	1300
甲丁酮	1266	1269	1080	1186	1306	1372	1425	1395
甲戊酮	1366	1370	1183	1288	1408	1479	1520	1490
甲己酮	1477	1476	1283	1391	1508	1580	1619	1536
甲异丁酮	1179	1181	1014	1108	1221	1291	1331	1314

表 14-71　醛与酮的保留指数（二）[30]

柱温：150℃

固定液 / I / 化合物	角鲨烷	SE-30	OV-7	OV-17	OV 22	OV 25	QF-1	XE-60
甲醛	187	229	180	401	414	333	291	607
乙醛	323	367	423	512	482	400	638	626
丙醛	430	479	537	606	603	604	756	762
丁醛	537	571	646	693	711	735	869	862
戊醛	642	688	757	806	827	846	987	987
己醛	746	788	857	905	926	917	098	1092
庚醛	848	889	957	1004	1026	1047	1197	1195
丙酮	412	465	534	592	603	637	808	736
甲乙酮	528	574	641	696	707	749	903	884
甲丙酮	623	666	733	783	804	839	995	983
甲丁酮	730	773	839	888	910	937	1106	1093
甲戊酮	829	873	939	986	1011	1040	1208	1193
甲己酮	929	978	1012	1089	1111	1140	1314	1297
甲异丁酮	582	727	785	830	845	878	1051	1028

表 14-72 羰基化合物保留指数[17]

固定液	OV-3		OV-7		固定液	OV-3		OV-7	
化合物①＼柱温/℃	205	245	205	245	化合物①＼柱温/℃	205	245	205	245
甲醛	2070	2137	2174	2251	2-甲基-5-己酮	2584	2628	2639	—
乙醛	2198	2251	2302	2370	肉桂醛		2651	—	—
2-丙酮	2272	2333	2363		2-甲基-1-己烯-5-酮	2610	2664	2700	
丙醛	2290	2336	2385	2438	2-甲基-5-庚酮		2727	—	—
丙烯醛	2279	2344	2385	—	2-己醛	—	2704	—	2815
2-甲基丙醛	2312	2354		—	庚醛	2666	2706	2763	2814
二甲基乙醛	2327	2357			呋喃-3-醛	2657	2724		—
2-丁酮	2356	2417	2437		呋喃-2-醛	2661	2723	2780	
丁醛	2378	2428	2472	2522	苯基乙醛	—	2781	—	
异亚丙基丙酮	—	2443	—	—	2-甲基-2-庚烯-6-酮	2706	2743	2792	2839
3-甲基-2-丁酮	2386	2448			辛醛	2763	2802	2859	2910
3-戊酮	2399	2455	2490		壬醛	2857	2897	2955	3004
3-甲基丁醛	2410	2451	-		乙基苯基酮		2910		—
丁二酮	2411	2460	—	—	苯甲醛	—	2927	2982	
2-戊酮	2423	2470	2510		香茅醛	—	2937	—	-
2,2-二甲基-3-丁酮	2433	2476	—	—	苯乙酮		2994	—	3098
3-羟基-2-丁酮	—	2509	—	—	癸醛	2951	2994	3050	3096
3-甲基-3-丁烯-2-酮	2450	2490	2531	—	柠檬醛	—	2998	3053	3100
2-丁醛	-	2519	2507		2-十一烷酮	2988	3035	3076	—
4-甲基-2-戊酮	2468	2526	—		香芹酮	—	3044	3078	3152
戊醛	2472	2513	2569	2624	十一醛	3052	3099	3154	3202
2-乙基丁醛	2487	2533	—	—	十二醛		3202	—	—
2-己酮	2527	2578	2607	—	对茴香醛	—	3213	—	—
己醛	2568	2611	2666	2719	十三醛	—	3302	—	—

①2,4-二硝基苯腙的衍生物。

表 14-73 酮、醛及醚类保留指数[69]

固定液：$C_{78}H_{158}$　　柱温：130℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
2-丁酮	537.5	己醛	749.5	1-乙酸基丁烷	739.5
2-戊酮	629.6	庚醛	851.0	1-乙酸基戊烷	840.1
2-己酮	731.4	二丙基醚	656.8	环戊酮	740.9
2-庚酮	831.4	二丁基醚	854.9	环己酮	853.9
戊醛	647.8	1-乙酸基丙烷	637.8		

表 14-74 C_1～C_4烷基叔丁基醚保留指数[71]

固定液	聚二甲基硅氧烷			聚氰基丙基甲基硅氧烷		
柱温/℃	90	100	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	70	80	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
化合物＼保留指数	I			I		
甲基叔丁基醚	562.7	563.7	1.0	596.6	598.9	2.3
乙基叔丁基醚	612.0	612.7	0.7	639.8	640.1	0.3
异丙基叔丁基醚	643.5	644.6	1.1	684.4	685.4	1.0
正丙基叔丁基醚	704.0	704.4	0.4	729.5	729.8	0.3
异丁基叔丁基醚	748.8	750.2	1.4	778.3	779.7	1.4
正丁基叔丁基醚	796.0	796.2	0.2	819.4	819.8	0.4

表 14-75 烷基叔丁基醚保留指数[40]

固定液：Carbowax 1540

I 柱温/℃ 化合物	40	60	80	100	120
甲基叔丁基醚	712	713	712	-	—
乙基叔丁基醚	712	713	712	—	—
异丙基叔丁基醚	739	739	737	—	—
正丙基叔丁基醚	764	766	763	—	—
烯丙基叔丁基醚	876	870	868	—	
异丁基叔丁基醚	798	800	800	—	—
仲丁基叔丁基醚	830	832	829	—	—
正丁基叔丁基醚	867	868	866	866	871
正戊基叔丁基醚	—	—	965	965	966
正己基叔丁基醚	—		1065	1067	1067
环己基叔丁基醚		1152	1150	1151	1152
正庚基叔丁基醚	·	--	1165	1168	1165
正辛基叔丁基醚	···	-	1266	1267	1267

表 14-76 醚保留指数[60]

柱温：120℃

I 固定液 化合物	SE-30	DC-550	QF-1	Carbowax 20M	XF 1150
二丁基醚	691	776	726	794	809
二烯丙基醚	593	631	656	771	773
二丙基醚	687	708	708	773	785
二异丙基醚	593	611	617	652	646
叔丁基异丙基醚	665	678	699	720	725
二戊基醚	1076	1104	1143	1165	1189
二异戊基醚	1002	1021	1067	1063	1094
乙基乙烯基醚	499	531	560	677	659
丁基乙烯基醚	695	731	778	858	880
异丁基乙烯基醚	655	684	736	800	806
2-乙基-1-己基乙烯基醚	1036	1064	1126	1179	1198
乙二醇二甲基醚	646	706	814	918	970
乙二醇二丁基醚	1160	1213	1278	1359	1387

表 14-77 乙二醇醚保留指数[4]

固定液	NPGS		Apiezon L		固定液	NPGS		Apiezon L	
I 柱温/℃ 化合物	140	170	140	170	I 柱温/℃ 化合物	140	170	140	170
乙二醇甲醚	1098	1150	534	744	四甘醇丙醚	—	2099	1557	1555
二甘醇甲醚	1474	1398	826	907	乙二醇丁醚	1316	1326	826	887
三甘醇甲醚	1833	1700	1114	1150	二甘醇丁醚	1668	1626	1109	1139
四甘醇甲醚	—	1980	1413	1416	三甘醇丁醚	2020	1892	1379	1396
乙二醇乙醚	1148	1219	622	718	四甘醇丁醚	—	2168	1651	1655
二甘醇乙醚	1492	1500	900	951	乙二醇单异丙醚	1154	—	652	·
三甘醇乙醚	1850	1771	1183	1198	乙二醇单异丁醚	1234	—	789	—
四甘醇乙醚	—	2048	1458	1463	乙二醇单异戊醚	1296	—	892	—
乙二醇丙醚	1223	1272	723	819	乙二醇	1430	1432	634	652
二甘醇丙醚	1573	1558	1002	1046	二甘醇	1782	1707	900	625
三甘醇丙醚	1926	1823	1283	1299	三甘醇	2132	1983	1143	1177

第四节　多种含氧化合物的保留指数

表 14-78　对苯醌保留指数（ -）[63]

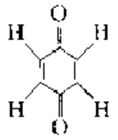
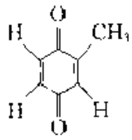
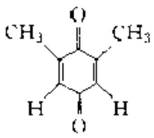
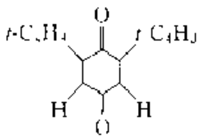
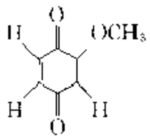
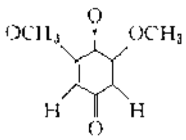
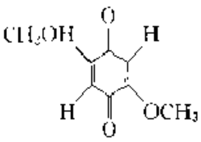
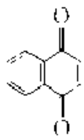
固定液	SE-30						OV-17								
柱温/℃	180	190	200	210	220	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	140	150	160	170	180	190	200	210	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
化合物 \ 保留指数	*I*						*I*								
	905	912	919	923	--	0.60	1151	1156	1163	1169	1175		-	..	0.60
	1008	1015	1018	1025	1031	0.58	—	1244	1250	1257	1260	—	—	1279	0.58
	1113	1119	1125	1130	—	0.57		1338	1343	—	1354	—	1367		0.58
	1468	1474	1480	—	1489	0.53	1609		1618	—	—	1633	1636		0.45
	1220	1228	1234	1240	--	0.66	1560	1566	1573	—	1585	—	1600	--	0.67
	1506	1515	1522	1530	-	0.80	—	—	1651	1658	1666	1675	1683	—	0.80
	1540	1549	1562	1573	—	1.10	—	—	—	—	1854	1869	1876	1885	1.03
	1410	1418	1427	1437	1444	0.85	—	—	1715	1724	1732	—	1757	—	1.05

表 14-79　对苯醌保留指数（二）[61]

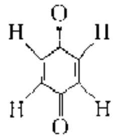
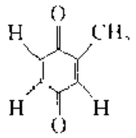
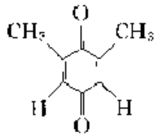
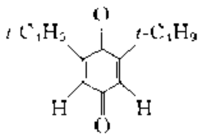
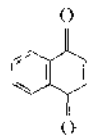
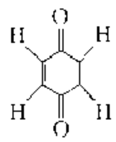
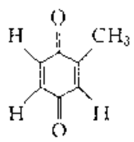
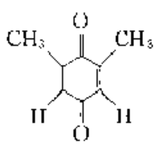
固定液	聚苯醚					Ucon 50 LB 550X						
柱温/℃	160	170	180	190	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	140	150	160	170	180	190	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
化合物 \ 保留指数	I					I						
	1287	1293	1299	1305	0.60	1241	1248	1256	1262		—	0.70
	1383	1390	1395	1400	0.57	1303	1310	1317	1323	1330	1337	0.68
	1480	1485	1490	1496	0.53	1392	1400	1406	1411	1417	1422	0.60
	1675	1682	1687	1692	0.57	1609	1613	1620	1626	1633	—	0.60
		1883	1889	1903	1.00	—	1812	1827	1831	1848	1865	1.33

表 14-80　对苯醌保留指数（三）[61]

固定液	XE-60					Carbowax 20M					DEGS				
柱温/℃	180	190	200	210	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	180	190	200	210	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	160	170	180	190	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
化合物 \ 保留指数	I					I					I				
	1469	1486	1509	1527	1.93	1562	1570	1579	1587	0.83	1917	1954	1983	2016	3.30
	1545	1566	1588	1602	1.90	1616	1621	1633	1640	0.80	1959	1994	2023	2055	3.20
	1632	1651	1671	1687	1.83	1681	1686	1695	1703	0.73	2014	2048	2084	2106	3.07

续表

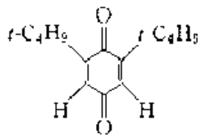
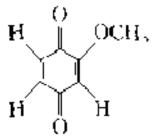
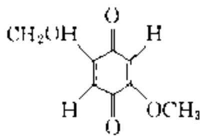
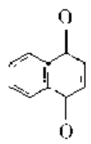
固定液	XE-60					Carbowax 20M					DEGS				
柱温/℃	180	190	200	210	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	180	190	200	210	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	160	170	180	190	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
保留指数 / 化合物	I					I					I				
	1826	1842	1858	1872	1.53	1809	1814	1820	1824	0.50	2036	2065	2098	2118	2.73
	2001	2026	2043	2066	2.17	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	2078	2099	2118	2145	2.23	—	—	—	—	—	—	—	—		
	2066	2093	2120	2145	2.67	2205	2216	2228	—	1.15	2544	2588	2645	2685	4.70

表 14-81 呋喃保留指数[67]

柱温：100 ℃

固定液 / I / 化合物	SE-30	OV-101	OV-17	Carbowax 40M	固定液 / I / 化合物	SE-30	OV-101	OV-17	Carbowax -40M
2-甲基呋喃	593	595	678	850	2-甲基-5-甲酰呋喃	932	936	1142	1558
2,5 二甲基呋喃	695	697	778	939	3-甲基-2-甲酰呋喃	934	938	1144	1562
2,4 二甲基呋喃	704	706	788	949	3,5-二甲基-2 甲酰呋喃	1021	1021	1221	1660
3-甲酰呋喃	804	806	1016	1458	2-乙酰呋喃	889	887	1080	1498

表 14-82 C_4、C_5 环氧化合物保留指数[58]

固定液：OV-101

柱温/℃	70	80	90	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	柱温/℃	70	80	90	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
保留指数 / 化合物	I				保留指数 / 化合物	I			
2-甲基-1,2-环氧丙烷	534.4	534.7	535.0	0.30	1,2-环氧戊烷	624.5	624.7	624.9	0.20
反 2,3-环氧丁烷	543.5	543.6	543.7	0.10	2-甲基-1,2-环氧丁烷	633.3	633.7	634.0	0.35
顺 2,3-环氧丁烷	572.6	573.1	573.6	1.00	反-2,3 环氧戊烷	654.9	655.0	655.1	0.10
1,2 环氧丁烷	587.0	587.4	587.8	0.40	顺-2,3-环氧戊烷	658.4	659.4	660.4	1.00
3 甲基-1,2-环氧丁烷	612.0	613.3	613.8	0.90	2-甲基-2,3-环氧丁烷	668.0	668.1	668.2	0.10

表 14-83 C_6 环氧化合物保留指数（一）[54]

固定液：链合二甲基硅烷

柱温/℃	50	60	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	柱温/℃	50	60	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
化合物 \ 保温指数	I			化合物 \ 保温指数	I		
2,3-二甲基-2,3-环氧丁烷	682.2	682.5	0.3	反-3,4-环氧己烷	736.9	737.0	0.1
反-4-甲基-2,3-环氧戊烷	695.8	696.0	0.2	反-2,3-环氧己烷	738.8	738.9	0.1
2-甲基-2,3-环氧戊烷	701.2	701.7	0.5	4-甲基-1,2-环氧戊烷	748.8	749.6	0.8
顺-4-甲基-2,3-环氧戊烷	712.1	713.0	0.9	顺-3,4-环氧己烷	758.2	758.3	0.1
2,3-二甲基-1,2-环氧丁烷	716.7	717.3	0.6	顺-2,3-环氧己烷	764.0	764.3	0.3
2-甲基-1,2-环氧戊烷	735.1	755.6	0.5				

表 14-84 C_6 环氧化合物保留指数（二）[32]

固定液：OV-101

柱温/℃	60	70	80	90	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
化合物 \ 保温指数	I				
2,3-二甲基-2,3-环氧丁烷	681.4	681.6	681.9	682.2	0.27
反-4-甲基-2,3-环氧戊烷	695.9	696.2	696.3	696.6	0.22
2-甲基-2,3-环氧戊烷	700.3	700.6	700.9	701.4	0.36
顺-4-甲基-2,3-环氧戊烷	712.4	713.6	714.5	715.4	1.00
2,3-二甲基-1,2-环氧丁烷	716.9	717.5	717.7	718.4	0.47
2-甲基-1,2-环氧戊烷	736.4	737.4	737.6	737.8	0.44
反-3,4-环氧己烷	737.7	737.4	737.6	737.8	0.03
反-2,3-环氧己烷	739.6	739.6	739.7	739.8	0.06
4-甲基-1,2-环氧戊烷	751.2	751.8	752.5	753.4	0.73
顺-3,4-环氧己烷	760.8	760.9	761.0	761.1	0.10
顺-2,3-环氧己烷	762.2	766.4	766.7	766.9	0.23

表 14-85 三环化合物保留指数[50]

柱温：250℃

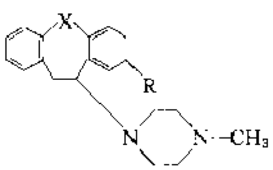
化合物 \ I \ 固定液			Dexsil 300	Dexsil 400	Dexsil 410
结构式	X	取代基			
	O	H	2524	2559	2494
	O	8-Cl	2606	2713	2620
	O	8-CH_3	2557	2586	2533
	O	8-SCH_3	2961	2998	2797
	Se	H	2768	2829	2697
	Se	8-Cl	2920	3009	2853
	CH_2	H	2550	2578	2530
	CH_2	8-Cl	2726	2778	2678

表 14-86 部分含氧化合物保留指数（一）[19]

柱温：120℃

化合物 \ I \ 固定液	Zonyl E 7	PEG 1540	三氰基乙氧基丙烷	聚苯醚六环	DEGS	化合物 \ I \ 固定液	Zonyl E 7	PEG 1540	三氰基乙氧基丙烷	聚苯醚六环	DEGS
甲醇	657	916	1228	522	1062	1-丁醇	944	1164	1473	820	1311
乙醇	704	933	1238	587	1083	异丁醇	897	1104	1396	772	1242
1-丙醇	823	1045	1353	703	1188	2-丁醇	867	1023	1312	737	1169
异丙醇	741	916	1201	613	1057	叔丁醇	816	909	1198	654	1056
烯丙醇	832	1112	1452	715	1284	1-戊醇	1055	1271	1582	929	1427

续表

化合物 \ 固定液 I	Zonyl E 7	PEG 1540	三氰基乙氧基丙烷	聚苯醚六环	DEGS
戊醇(ACTG)	1010	1220	1514	886	1361
异戊醇	1025	1229	1529	885	1375
叔戊醇	917	1014	1298	771	1163
环戊醇	1085	1337	1677	996	1518
1-己醇	1160	1383	1691	1032	1544
反-2-己醇	1167	1416	1757	1046	1601
2-己醇	1090	1211	1531	950	1386
3-己醇	1065	1212	1497	941	1357
2-甲基-2-戊醇	1022	1110	1393	868	1255
3-甲基-3-戊醇	1038	1132	1427	900	1289
1-庚醇	1262	1489	1794	1138	1648
反-2-庚醇	1278	1530	1880	1163	1737
1-辛醇	1370	1590	1902	1241	1766
反-2-辛醇	1383	1639	1979	1262	1832
顺,顺-2,6-二甲基环己醇	1235	1423	1714	1168	1583
顺,反-2,6-二甲基环己醇	1297	1492	1826	1219	1687
反,反-2,6-二甲基环己醇	1272	1440	1757	1173	1611
2-甲基-2-庚醇	1222	1310	1582	1065	1455
3-甲基-3-庚醇	1220	1307	1584	1078	1456
1-壬醇	1478	1712	2012	1350	1855
2-癸醇	1571	1796	2102	1439	1959
α-萜品醇(DL)	1526	1709	2100	1426	1968
1-十一醇	1702	1919	2234	1569	2088
1-十二醇	1813	2028	2345	1678	2208
环外乙基葑醇	1360	1678	2010	1480	1890
乙醛	738	712	1073	541	911
丙醛	830	825	1170	656	988
丙烯醛	842	861	1226	659	1053
丁醛	933	909	1263	753	1078
异丁醛	887	834	1173	706	992
反-2-丁烯醛	1096	1086	1517	870	1305
异戊醛	1002	948	1290	813	1103
糠醛	1358	1495	2037	1135	1816
己醛	1149	1113	1473	966	1294
反-2-己烯醛	1315	1276	1713	1077	1502
庚醛	1249	1226	1573	1066	1398
反-2-庚烯醛	1400	1365	1795	1172	1500
辛醛	1345	1321	1668	1167	1504
反-2-辛醛	1287	1417	1729	1154	1603
苯甲醛	1452	1534	2076	1272	1865
水杨醛	1521	1683	2194	1356	2050
丙酮	904	839	1239	652	1034
2-丁酮	993	932	1329	761	1121
丁二酮	1001	999	1408	772	1220
2-戊酮	1092	1030	1424	857	1230
环戊酮	1270	1258	1748	1050	1509
2-己酮	1195	1123	1512	966	1302
3-己酮	1119	1084	1456	945	1259
环己酮	1384	1365	1865	1160	1623
2-庚酮	1293	1225	1617	1061	1411
环庚酮	1491	1479	1990	1286	1760
2-辛酮	1400	1332	1718	1165	1521
环辛酮	1600	1590	2111	1404	1889
苯乙酮	1612	1684	2243	1387	2018
2-壬酮	1498	1427	1818	1264	1622
环壬酮	1710	1702	2232	1521	2009
2-癸酮	1597	1526	1915	1366	1735
环癸酮	1820	1812	2353	1639	2142
香芹酮	1752	1747	2154	1566	2063
2-十一酮	1696	1619	2012	1469	1818
环十一酮	1931	1923	2471	1757	2269
2-十二酮	1799	1717	2109	1571	1916
环十二酮	2040	2035	2595	1875	2396
环十三酮	2151	2145	2716	1994	2522
环十四酮	2261	2256	2837	2111	2613
乙醚	658	627	750	574	765
丁醚	984	971	1099	936	1031
呋喃	695	805	1040	628	964
1,4-二噁烷	1106	1108	1528	924	1347
2-乙酰基-3-甲基呋喃	1579	1618	2166	1305	1891
2-乙酰基-5-甲基呋喃	1612	1641	2211	1319	1951
2-丙基-3-甲基呋喃	1479	1566	1987	1300	1801
2,4,5-三甲基噁唑	1231	1242	1595	1044	1465
苯甲醚	1251	1333	1785	1150	1618
对丙烯基茴香醚	1702	1828	2326	1567	2155
1,8-桉树脑	1251	1249	1506	1178	1406
乙酸	1035	1125	1823	731	1680
丙酸	1150	1546	1914	886	1763
丁酸	1235	1618	1994	985	1848
异丁酸	1206	1572	1908	915	1773
3-丁烯酸	1248	1738	2140	983	1991
α-甲基丁酸	1345	1674	2012	1091	1891
戊酸	1371	1749	2099	1108	1951
异戊酸	1302	1664	2016	1042	1877
己酸	1483	1858	2191	1233	1963
异己酸	1417	1779	2128	1148	1877
庚酸	1595	1966	2283	1358	2059
辛酸	1707	2074	2375	1483	2147
壬酸	1819	2182	2467	1608	2236
癸酸	1931	2290	2559	1733	2333
十一酸	2043	2398	2651	1858	2426
十二酸	2155	2506	2714	1982	2519
乙酸甲酯	886	840	1161	666	1026
乙酸乙酯	960	913	1221	751	1078
丙酸甲酯	955	929	1241	770	1099
甲酸丙酯	950	932	1260	762	1112
乙酸丙酯	1054	984	1298	844	1152
乙酸丁酯	1170	1110	1422	958	1271
丁酸丙酯	1218	1145	1446	934	1297
乙酸戊酯	1269	1209	1513	1058	1369
乙酸异戊酯	1231	1147	1446	1010	1301
异丁酸-异丁酯	1226	1119	1371	1012	1238
水杨酸甲酯	1237	1497	1807	1069	1760
异戊酸异戊酯	1432	1325	1592	1217	1464
乙酸苯酯	1651	1719	2314	1378	2082
苯甲酸甲酯	1594	1924	2502	1112	2290
乙酸-2-乙氧基乙基酯	1358	1333	1776	1112	1573

表 14-87 部分含氧化合物保留指数（二）[34]

固定液：Carbowax 1540＋KOH（99－1）

化合物 \ I \ 柱温/℃	70	81	90	126	化合物 \ I \ 柱温/℃	70	81	90	126
丙醇	1044.9	1039.5	1039.3	1049.4	丁酸乙酯	1042.4	1043.1	1044.3	1049.4
丁醇	1151.3	1149.7	1149.6	1156.2	戊酸乙酯	1140.2	1141.1	1142.9	1147.3
戊醇	1256.3	1256.2	1258.1	1261.8	己酸乙酯	1235.2	1263.3	1240.6	1245.3
己醇	1357.7	1359.1	1363.1	1360.9	庚酸乙酯	1331.8	1337.2	1341.2	1344.1
庚醇	1463.4	1464.4	1470.4	1467.1	辛酸乙酯	1428.5	1432.5	1440.8	1442.1
辛醇	1567.7	1569.1	1577.2	1571.6	壬酸乙酯	1524.3	1530.4	1539.3	1540.4
壬醇	1672.1	1673.8	1684.1	1675.1	癸酸乙酯	1620.4	1628.0	1637.1	1638.1
癸醇	1776.4	1778.5	1790.8	1779.2	丁酸正丙酯	1127.9	1129.8	1131.6	1137.9
丁醛	890.6	889.0	900.0	917.9	戊酸正丙酯	1223.0	1227.8	1229.5	1234.3
戊醛	992.7	998.1	1000.1	1017.3	己酸正丙酯	1316.7	1320.0	1325.7	1330.9
己醛	1093.4	1097.4	1101.5	1112.5	庚酸正丙酯	1412.9	1420.7	1425.3	1427.5
庚醛	1191.7	1195.8	1202.1	1291.0	辛酸正丙酯	1508.3	1513.4	1523.4	1521.0
辛醛	1292.6	1300.3	1303.7	1315.8	壬酸正丙酯	1602.2	1612.3	1620.9	1620.6
壬醛	1391.9	1400.6	1405.5	1415.3	癸酸正丙酯	1698.0	1708.7	1718.9	1716.7
癸醛	1492.2	1504.1	1505.9	1515.2	丁酸正丁酯	1220.2	1223.4	1227.1	1231.3
丁酸甲酯	994.0	994.5	996.9	999.1	戊酸正丁酯	1314.2	1319.3	1323.1	1328.8
戊酸甲酯	1091.0	1094.9	1096.2	1101.4	己酸正丁酯	1407.1	1411.5	1419.5	1422.4
己酸甲酯	1190.6	1192.5	1197.2	1205.9	庚酸正丁酯	1501.6	1511.5	1513.3	1520.2
庚酸甲酯	1287.8	1292.6	1297.4	1302.4	辛酸正丁酯	1596.4	1605.5	1615.3	1616.7
辛酸甲酯	1385.5	1389.2	1397.5	1402.0	壬酸正丁酯	1689.8	1701.2	1710.2	1712.9
壬酸甲酯	1482.7	1489.0	1497.6	1502.0	癸酸正丁酯	1783.8	1796.8	1807.2	1809.1
癸酸甲酯	1580.0	1587.5	1596.4	1600.4					

表 14-88 部分含氧化合物保留指数（三）[20]

固定液：$C_{87}H_{176}$

柱温/℃	70	130	190		柱温/℃	70	130	190	
化合物 \ 保留指数	I			$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	化合物 \ 保留指数	I			$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
1-乙酸基乙烷	548.6	544.0	539.1	−0.77	2-辛醇		948.3	855.1	1.15
1-乙酸基丙烷	644.1	638.9	633.7	−0.87	2-甲基-2-丙醇	478.1	473.3	—	−0.80
1-乙酸基丁烷	743.7	740.9	738.1	−0.46	2-甲基-2-丁醇	595.6	600.9	605.2	0.71
1-乙酸基戊烷	843.7	841.1	838.5	−0.41	2-甲基-2-戊醇	688.8	693.8	698.8	0.85
1-乙酸基己烷	940.8	939.4	938.0	−0.24	2-甲基-2-己醇	782.1	788.3	794.2	0.99
1-乙酸基庚烷	—	1039.9	1038.8	−0.19	2-甲基-2-庚醇	879.9	885.8	891.7	0.99
1-乙酸基辛烷	—	1138.2	1138.5	0.05	2-甲基-2-辛醇	··	986.5	988.3	0.97
1-乙酸基壬烷	—	1237.7	1238.1	0.07	2-丁酮	540.2	543.5	—	0.55
1-丁醇	602.2	600.9	599.6	−0.22	2-戊酮	629.6	632.2	634.8	0.43
1-戊醇	700.3	701.9	703.5	0.27	2-己酮	729.4	733.7	738.0	0.72
1-己醇	798.0	803.6	809.2	0.94	2-庚酮	828.8	833.4	838.0	0.76
1-庚醇	898.3	905.6	912.9	1.22	2-辛酮	927.9	933.2	938.5	0.88
1-辛醇		1006.6	1014.3	1.29	2-壬酮		1033.1	1039.5	1.02
1-壬醇	—	1110.0	1117.5	1.10	2-癸酮	—	1134.4	1139.7	0.89
2-丙醇	416.0	442.0		0.66	2-十一酮	—	1234.6	1240.1	0.96
2-丁醇	547.9	552.0	—	0.69	二乙基醚	483.6	470.7	—	−1.99
2-戊醇	643.6	648.2	652.8	0.77	二丙基醚	659.0	655.2	651.4	0.64
2-己醇	742.1	748.0	753.6	0.91	二丁基醚	858.0	855.1	852.2	−0.49
2-庚醇	841.8	848.0	854.2	1.04	二戊基醚	—	1053.0	1051.0	0.3

表 14-89　部分含氧化合物保留指数（四）[66]

固定液：$C_{78}H_{158}+C_{77}H_{155}OH$　　柱温：130℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
2-戊酮	631.6	二戊基醚	1051.1	1-乙酸基戊烷	841.3
2-己酮	732.8	戊醛	651.6	1-乙酸基己烷	940.5
2-庚酮	832.8	己醛	751.8	1-乙酸基庚烷	1040.4
2-辛酮	932.6	庚醛	852.7	环戊酮	743.5
2-壬酮	1032.7	辛醛	953.3	环己酮	857.2
二丙基醚	657.1	1-乙酸基丙烷	639.8		
二丁基醚	854.5	1-乙酸基丁烷	741.0		

表 14-90　部分含氧化合物保留指数（五）[18]

柱温：50℃

化合物 \ 固定液 I	Ucon LB-550X	癸二酸二乙基己基酯	角鲨烷	PEG 1540	化合物 \ 固定液 I	Ucon LB 550X	癸二酸二乙基己基酯	角鲨烷	PEG 1540
乙基乙烯基醚	563	537	475	690	甲缩醛	589	548	472	751
二甲基醚	405	366	325	—	二甲基乙缩醛	660	621	547	815
乙醛	499	449	339	721	甲酸乙酯	623	570	463	843
甲酸甲酯	543	485	376	778	甲醇	644	536	438	932
二乙基醚		520	478	632	乙醇	696	599	435	968
甲基异丙基醚	567	541	482	696	丙酮二甲基乙缩醛	711	675	615	842
丙醛	591	550	443	810	甲酸正丙酯	724	674	564	937
丙酮	601	558	437	840	4-甲基 1,2 二噁茂烷	757	708	603	985
乙酸甲酯	631	575	472	847	碳酸二甲酯	743	685	556	1008

表 14-91　部分含氧化合物保留指数（六）[44]

固定液：PEG-20M　　柱温：75℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
乙醛	633	二丙酮醇	817	甲醇	1009
丙醛	766	丙烯醛	870	乙醇	1108
丙酮	806	丁酮	982	苯	1201

表 14-92　部分含氧及其他化合物保留指数[1]

固定液：OV-17

化合物 \ 柱温/℃ I	90	120	150	化合物 \ 柱温/℃ I	90	120	150	化合物 \ 柱温/℃ I	90	120	150
二氯甲烷	717	724	717	戊醛	798	800	800	己酸甲酯	1019	1020	1019
三氯甲烷	742	757	761	丁烯醛	785	780	775	庚醛	1007	1008	1008
二甲基呋喃	671	605	668	2,3 戊二酮	803	796	791	己醇	965	975	964
丁醛	686	685	683	甲苯	870	882	903	丙基苯	1058	1070	1087
四氯化碳	636	642	640	丁酸甲酯	812	813	810	甲基丙烯酸丁酯	1080	1089	1073
丙酸甲酯	714	718	712	丁醇	754	762	746	2-辛酮	1102	1098	1112
3-丁烯-2-酮	696	686	683	甲基丙烯酸乙酯	884	891	868	庚醇	1067	1069	1067
苯	762	772	800	2 氯乙醇	829	825	820	丁基苯	1157	1171	1186
二氢吡喃	797	800	805	己醛	903	904	903	戊醚	1125	1118	1127
2,3-丁二酮	688	679	683	5-己烯-2-酮	894	893	892	辛酸甲酯	—	1224	1220
丙醚	717	706	717	戊醇	862	870	854	辛醇	—	1184	1173
丁基乙烯基醚	752	737	728	间二甲苯	975	987	1006	十一烷	1099	1099	1098
丙醇	647	650	640	丁醚	924	916	914	壬醇	—	1286	1277
甲基丙烯酸甲酯	814	819	810	丙烯酸丁酯	1004	1011	997	己醚	--	1266	1262
2-戊酮	794	785	800	2-庚酮	1002	997	1008	十二烷	1300	1299	1299

表 14-93 部分含氧及含氮化合物保留指数[27]

固定液：SE-30

化合物	柱温/℃	I	化合物	柱温/℃	I	化合物	柱温/℃	I
苯酚	186	1490	对甲苯甲酸	228	1910	苯胺	164	1360
对甲酚	186	1570	十二酸	224	1700	环己基胺	110	875
对氯酚	186	1690	二十酸	300	—	2-苯基乙基胺	186	1890
对溴酚	186	1685	丁基胺	164	1280			
苯甲酸	186	1690	二乙基胺	126	580			

表 14-94 羟基联苯保留指数[35]

柱温：197 ℃

I 固定液 / 化合物	OV-101	OV-17	OV 210	OV-225	XE-60
2-羟基联苯	1622	1808	1784	2180	2167
3-羟基联苯	1677	2021	1978	2598	2604
4-羟基联苯	1683	2034	1980	2624	2632
2,2'-二羟基联苯	1655	2004	1950	2611	2605
2,5-二羟基联苯	1805	2202	2189	2919	2937
2,4'-二羟基联苯	1820	2226	2204	—	—
3,4-二羟基联苯	1918	2318	2314	—	3154
3,3'-二羟基联苯	1976	2426	2414	--	3419
4,4'-二羟基联苯	1979	2441	2442	—	3432

参 考 文 献

1 Hatch R. J Gas Chrom, 1968; 6: 661

2 Dollos F C, Koeppl K G. J Chrom Sci, 1969; 7: 565

3 Germaine R W, Haken J K. J Chromatogr, 1969; 43: 33

4 Singliar M, Dykyi J. Coll Cze Chem Comm, 1969; 34: 773

5 Головня Р В, Уралец В П. Ж А Х, 1969; 24: 449

6 Allen D, Haken J K. J Chromatogr, 1970; 51: 415

7 Jung G, Pauschmann H, Voelter W, et al. Chromatographia, 1970; 3: 26

8 Zarazir D, Chovin P, Guiochon G. Chromatographia, 1970; 3: 180

9 Ashes J R, Halen J K. J Chromatogr, 1971; 62: 39

10 Brooks C J W, Gilbert M T, Gilbert J D. Anal Chem, 1973; 45: 897

11 Головня Р В, Теренина М Б, Уралец В П. Изв АН СССР Сер Хим, 1973; 2351

12 Ashes J R, Haken J K. J Chromatogr, 1974; 101: 103

13 Haken J K, Ho D K M, Vaughan C E. J Chromatogr, 1975; 106: 317

14 Haken J K, Ho D K M, Wainwright M. J Chromatogr, 1975; 106: 327

15 Krupcik J, Tesarik K, Hrivnak J. Chramatographia, 1975; 8: 553

16 Pias J B, Gasco L. Anal Chem Acta, 1975; 75: 139

17 Pias J B, Gasco L. Chromatographia, 1975; 8: 270

18 Ubik K, Stransky K, Streibl. Coll Cze Chem Comm, 1975; 40: 2834

19 Vernon F, Sharples W E, Kyffin T W. J Chromatogr, 1975; 111: 117

20 Riedo F, Feitz D, Tarjan G, et al. J Chromatogr, 1976; 126: 63

21 Buryan P, Macak J. Chromatogr, 1977; 139: 69

22 Golovnya R V, Kuzmenko T E. Chromatographia, 1977; 10: 545

23 Kaliszan R. Chromatographia, 1977; 10: 529

24 Petersson G. J Chrom Sci, 1977; 15: 245

25 Welsch Th, Engewald W, Klaucke Ch. Chromatographia, 1977; 10: 22

26 Bryan P, Macak J. J Chromatogr, 1978; 150: 246

27 Francis A J, Morgan E D, Poole C F. J Chromatogr, 1978; 161: 111
28 Radecki A, Gryzbowsky J. J Chromatogr, 1978; 152: 211
29 Friocourt M P, Berthou F, Picart D, et al. J Chromatogr, 1979; 172: 261
30 Haken J K, Nguyer A, Wainwright M S. J Chromatogr, 1979; 179: 75
31 Ashes J R, Haken J K, Millis. J Chromatogr, 1980; 187: 297
32 Poole C F, Zlatkis A. J Chromatogr, 1980; 184: 99
33 Calixto F S, Raso A G. Chromatographia, 1981; 14: 113
34 Calixto F S, Raso A G. J Chromatogr, 1981; 216: 326
35 Dufek P, Pacakova V, Zivny K. J Chromatogr, 1981; 211: 150
36 Haken I K, Chretien I R, Lion C. J Chromatogr, 1981; 217: 125
37 Sellier F, Tersac G, Guiochon G. J Chromatogr, 1981; 219: 213
38 Becerra M R, Sanches E F, Garcia-Dominguez J A. J Chrom Sci, 1982; 20: 363
39 Patte F, Etcheto M, Laffort L. Anal Chem, 1982; 54: 2239
40 Singliar M, Macho V, Kavala M. Coll Cze Chem Comm, 1982; 47: 1979
41 Szasz Cy, Valko K, Papp O, et al. J Chromatogr, 1982; 243: 347
42 Haken J K, Hartley H N T, Srisukh D. Chromatographia, 1983; 17: 589
43 Brooks C J W, Cole W J, Barrett G M. J Chromatogr, 1982; 315: 119
44 杨同华. 第一次全国石油化工色谱学术报告会文集, 1984; 474
45 Bermejo J, Guillen M D. J Chromatogr, 1985; 318: 187
46 Haken J K, Korhonen I O O. J Chromatogr, 1985; 319: 131
47 Haken J K, Korhonen I O O. J Chromatogr, 1985; 324: 343
48 Horna A, Taborsky J, Churacek J, et al. J Chromatogr, 1985; 348: 141
49 Korhonen I O O. J Chromatogr, 1985; 329: 43
50 Tomkova H, Kuchar M, Rejholecv, et al. J Chromatogr, 1985; 329: 133
51 林秀英, 粪文华. 色谱, 1985; 2: 175
52 Boneva S, Dimov N. Chromatographia, 1986; 22: 271
53 Hermann F, Dufka O, Churacek J. J Chromatogr, 1986; 360: 79
54 Korhonen I O O. J Chromatogr, 1986; 363: 277
55 Riego J, Garcia Raso A. J Chromatogr, 1986; 360: 231
56 罗春荣, 林炳承, 李浩春等. 色谱, 1986; 4: 171
57 Boneva S. Chromatographia, 1987; 23: 50
58 Boneva S, Dimov N. Chromatographia, 1987; 23: 770
59 Brooks C J W, Cole W J. J Chromatographia, 1987; 399: 207
60 Garcia-Rase A, Castro I M, Paez M T, et al. J Chromatogr, 1987; 398: 9
61 Llobera A, Garcia Raso A. J Chromatogr, 1987; 393: 305
62 Engewald W, Billing U, Topalova I, et al. 1988; 446: 7
63 Hanai T, Hong C. HRC &CC, 1989; 12: 327
64 Boneva S. Chromatographia, 1990; 29: 322
65 Avyangar N R, Tambe A S, Biswas S S. J Chromatogr, 1991; 543: 179
66 Dutoit J C. J Chromatogr, 1991; 555: 191
67 Golovnya R V, Misharina T A, Beletskiy I V. Chromatographia, 1992; 34: 497
68 Reddy K S, Dutoit J C, Kovats E. J Chromatogr, 1992; 609: 229
69 Arruda A C, Heinzen V E F, Yunes R A. J Chromatogr, 1993; 630: 251
70 Berezkin V G. HRC, 1994; 17: 28
71 Boneva S, Toromanova Petrova P. Chromatographia, 1994; 39: 225

（李浩春　修振佳）

第十五章　含氮化合物的保留指数

第一节　硝基化合物的保留指数

表 15-1　硝基烷烃保留指数（一）[1]

固定液	PEG-20M			Reoplex 400		
化合物 \ I \ 柱温/℃	90	100	110	90	100	110
硝基甲烷	1132	1150	1150	1134	1140	1165
硝基乙烷	1132	1150	1150	1155	1164	1190
2-硝基丙烷	1095	1115	1115	1134	1140	1165
1-硝基丙烷	1186	1204	1204	1213	1225	1251
2-硝基丁烷	1160	1182	1182	1198	1211	1238
2-甲基-1-硝基丙烷	1210	1232	1234	1228	1241	1265
1-硝基丁烷	1275	1286	1290	1315	1325	1347

表 15-2　硝基烷烃保留指数（二）[1]

固定液	SF 96			Ucon LB-550-X			Tween 80		
化合物 \ I \ 柱温/℃	90	100	110	90	100	110	90	100	110
硝基甲烷	565	565	565	770	770	770	986	990	993
硝基乙烷	634	638	638	824	824	824	1009	1014	1018
2-硝基丙烷	683	686	686	839	839	841	994	1001	1006
1-硝基丙烷	723	724	724	897	897	897	1064	1072	1077
2-硝基丁烷	774	776	776	910	920	923	1064	1072	1077
2-甲基-1-硝基丙烷	774	776	776	931	931	934	1083	109	1096
1-硝基丁烷	822	824	824	989	990	992	1150	1159	1164

表 15-3　硝基烷烃保留指数（三）[1]

固定液：$C_{87}H_{176}$

柱温/℃	70	130	190	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	柱温/℃	70	130	190	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
化合物 \ 保留指数	I				化合物 \ 保留指数	I			
1-氰基丙烷	587.4	593.6	599.9	1.03	1-氰基癸烷	—	1302.4	1315.6	2.20
1-氰基丁烷	689.1	697.6	705.7	1.39	硝基乙烷	563.7	578.6	—	2.48
1-氰基戊烷	789.5	799.1	808.7	1.60	1-硝基丙烷	654.7	665.1	675.5	1.73
1-氰基己烷	888.2	899.7	911.2	1.91	1-硝基丁烷	754.6	767.2	779.8	2.10
1-氰基庚烷	990.3	1001.3	1012.3	1.84	1-硝基戊烷	855.1	868.8	882.5	2.29
1-氰基辛烷	—	1102.9	1114.7	1.97	1-硝基己烷	—	969.9	984.8	2.48
1-氰基壬烷	—	1202.9	1215.3	2.07					

表 15-4　氰基与硝基烷烃保留指数[2]

固定液：$C_{78}H_{158}+C_{77}H_{155}OH$　　柱温：130℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
1-氰基丙烷	593.8	1-氰基庚烷	1000.7	1-硝基戊烷	868.6
1-氰基丁烷	697.0	硝基乙烷	571.9	1-硝基己烷	970.1
1-氰基戊烷	798.8	1-硝基丙烷	664.6	硝基苯	1053.9
1-氰基己烷	899.8	1-硝基丁烷	767.0		

表 15-5 芳烃与硝基芳烃保留指数[26]

固定液：SE-30

I 化合物 \ 柱温/℃	180	200	220	240	I 化合物 \ 柱温/℃	180	200	220	240
萘	1210	1242	1244	1262	4-硝基联苯	1816	1839	1856	1891
1-硝基萘	1597	1618	1625	1662	芴	1595	1617	1625	1662
2-硝基萘	1635	1656	1672	1708	2-硝基芴	2037	2066	2095	2129
联苯	1387	1408	1411	1433	4-硝基对三联苯	-	2586	2620	2654
2-硝基联苯	1670	1686	1698	1736	菲	1765	1792	1822	1850
3-硝基联苯	1792	1813	1831	1865	䓛	—	2371	2408	2456

表 15-6 烷基硝基苯酚保留指数[16]

柱温：150℃

I 化合物 \ 固定液	E-301	新戊二醇丁二酸酯	I 化合物 \ 固定液	E-301	新戊二醇丁二酸酯
邻硝基苯酚	1050	1566	4-叔戊基-6-硝基苯酚	1547	914
2-甲基-6-硝基苯酚	1130	1621	3-(4-羟基-5-硝基苯基)戊烷	1562	1955
2-异丙基-6-硝基苯酚	1271	1721	2-(4-羟基-5-硝基苯基)戊烷	1562	1976
2-仲丁基-6-硝基苯酚	1395	1786	3-(4-羟基-5-硝基苯基)己烷	1629	2014
2-叔戊基-6-硝基苯酚	1543	1862	2-(4-羟基-5-硝基苯基)己烷	1629	2039
3-(2-羟基-3-硝基苯基)戊烷	1542	1834	4-叔辛基-6-硝基苯酚	1730	2087
2-(2-羟基-3-硝基苯基)戊烷	1542	1867	对硝基苯酚	1588	2642
3-(2-羟基-3-硝基苯基)己烷	1629	1920	2-甲基-4-硝基苯酚	1588	2522
2-(2-羟基-3-硝基苯基)己烷	1629	1954	2-异丙基-4-硝基苯酚	1697	2698
4-(2-羟基-3-硝基苯基)辛烷	1774	2084	2-叔丁基-4-硝基苯酚	1782	2797
3-(2-羟基-3-硝基苯基)辛烷	1774	2084	2-仲丁基-4-硝基苯酚	1797	2778
2-(2-羟基-3-硝基苯基)辛烷	1822	2114	2-叔戊基-4-硝基苯酚	1865	2845
1-苄基-6-硝基苯酚	1140	1660	3-(2-羟基-5-硝基苯基)戊烷	1830	2837
4-异丙基-6-硝基苯酚	1276	1773	2-(2-羟基-5-硝基苯基)戊烷	1861	2860
4-叔丁基-6-硝基苯酚	1361	1800	3-(2-羟基-5-硝基苯基)己烷	1919	2875
4-仲丁基-6-硝基苯酚	1436	1852	2-(2-羟基-5-硝基苯基)己烷	1960	2978

表 15-7 硝基酚与苯胺保留指数[37]

柱温：170℃

I 化合物 \ 固定液	二苯并-18-冠-6	二苯并-24-冠-8	二环已-24-冠-8
邻硝基酚	1839	1754	1761
间硝基酚	2130	2647	2671
对硝基酚	2183	2798	2804
邻硝基苯胺	2057	2335	2312
间硝基苯胺	2124	2533	2504
对硝基苯胺	2230	2816	2774

表 15-8 硝基苯甲酸酯保留指数 (一)[28]

固定液：SE-30

I 化合物 \ 柱温/℃	140	160	180	200	I 化合物 \ 柱温/℃	140	160	180	200
苯甲酸甲基乙酯	1223	1172	1185	1208	苯甲酸-1-甲基丁酯	1389	1371	1380	1395
苯甲酸-1-甲基丙酯	1307	1276	1293	1287	苯甲酸-3-甲基丁酯	1429	1414	1428	1438
苯甲酸-2-甲基丙酯	1331	1308	1319	1312	4-硝基苯甲酸甲基乙酯	1540	1536	1551	1561
苯甲酸-1,2-二甲基丙酯	1375	1355	1368	1386	4-硝基苯甲酸-1-甲基丙酯	1633	1634	1652	1668

续表

I 柱温/℃ 化合物	140	160	180	200	I 柱温/℃ 化合物	140	160	180	200
4-硝基苯甲酸-2-甲基丙酯	1653	1657	1671	1685	4-硝基苯甲酸-4-戊烯酯	1783	1793	1804	1820
4-硝基苯甲酸-1,2-二甲基丙酯	1705	1710	1726	1741	4-硝基苯甲酸-反-3-己烯酯	1884	1897	1907	1925
4-硝基苯甲酸-1-甲基丁酯	1721	1724	1740	1753	4-硝基苯甲酸-顺-3-己烯酯	1885	1897	1907	1925
4-硝基苯甲酸-3-甲基丁酯	1759	1765	1781	1797	3,5-二硝基苯甲酸-2-丙烯酯	1833	1844	1851	1865
3,5-二硝基苯甲酸甲基乙酯	1783	1788	1800	1816	3,5-二硝基苯甲酸-2-丙炔酯	1846	1857	1862	1873
3,5-二硝基苯甲酸-1-甲基丙酯	1872	1878	1891	1905	3,5-二硝基苯甲酸-3-丁烯酯	1920	1934	1942	1958
3,5-二硝基苯甲酸-2-甲基丙酯	1889	1897	1910	1925	3,5-二硝基苯甲酸-1-甲基-3-丁烯酯	1940	1951	1961	1978
3,5-二硝基苯甲酸-1,2-二甲基丙酯	1933	1940	1955	1973	3,5-二硝基苯甲酸-反-2-丁烯酯	1948	1956	1967	1986
3,5-二硝基苯甲酸-1-甲基丁酯	1955	1961	1974	1989	3,5-二硝基苯甲酸-4-戊烯酯	2025	2040	2049	2064
3,5-二硝基苯甲酸-3-甲基丁酯	1995	2003	2018	2034	3,5-二硝基苯甲酸-反-3-己烯酯	2119	2134	2144	2160
苯甲酸-2-丙烯酯	1254	1221	1263	1261	3,5-二硝基苯甲酸-顺-3-己烯酯	2119	2134	2144	2160
苯甲酸-2-丙炔酯	1262	1235	1265	1261	苯甲酸乙酯	1174	1147	1169	1100
苯甲酸-3-丁烯酯	1343	1327	1352	1361	苯甲酸-2-氯乙酯	1381	1375	1394	1361
苯甲酸-1-甲基-3-丁烯酯	1370	1355	1380	1395	苯甲酸-2,2-二氯乙酯	1465	1462	1482	1476
苯甲酸-反-2-丁烯酯	1375	1359	1381	1395	苯甲酸-2,2,2-三氯乙酯	1530	1533	1551	1552
苯甲酸-4-戊烯酯	1447	1442	1463	1476	4-硝基苯甲酸乙酯	1501	1501	1521	1517
苯甲酸-反-3-己烯酯	1510	1536	1553	1557	4-硝基苯甲酸-2-氯乙酯	1725	1732	1753	1764
苯甲酸-顺-3-己烯酯	1549	1547	1563	1568	4-硝基苯甲酸-2,2-二氯乙酯	1809	1821	1841	1853
4-硝基苯甲酸-2-丙烯酯	1580	1586	1601	1614	4-硝基苯甲酸-2,2,2-三氯乙酯	1867	1875	1897	1916
4-硝基苯甲酸-2-丙炔酯	1587	1593	1603	1614	3,5-二硝基苯甲酸乙酯	1752	1762	1777	1783
4-硝基苯甲酸-3-丁烯酯	1675	1681	1698	1711	3,5-二硝基苯甲酸-2-氯乙酯	1992	1992	2015	2029
4-硝基苯甲酸-1-甲基-3-丁烯酯	1706	1716	1728	1742	3,5-二硝基苯甲酸-2,2-二氯乙酯	2073	2074	2099	2111
4-硝基苯甲酸-反-2-丁烯酯	1706	1716	1728	1742	3,5-二硝基苯甲酸-2,2,2-三氯乙酯	2105	2116	2136	2152

表 15-9　硝基苯甲酸酯保留指数（二）[28]

固定液：OV-351

I 柱温/℃ 化合物	180	200	220	I 柱温/℃ 化合物	180	200	220
苯甲酸甲基乙酯	1684	—	—	苯甲酸-3-丁烯酯	1912	—	
苯甲酸-1-甲基丙酯	1771	—	—	苯甲酸-1-甲基-3-丁烯酯	1892		—
苯甲酸-2-甲基丙酯	1806	—	—	苯甲酸-反-2-丁烯酯	1961	—	—
苯甲酸-1,2-二甲基丙酯	1827	—	—	苯甲酸-4-戊烯酯	2012		—
苯甲酸-1-甲基丁酯	1848			苯甲酸-反-3-己烯酯	2089	—	—
苯甲酸-3-甲基丁酯	1911	—	—	苯甲酸-顺-3-己烯酯	2107		—
4-硝基苯甲酸甲基乙酯	2287	2300	2339	4-硝基苯甲酸-2-丙烯酯	2446	2458	2486
4-硝基苯甲酸-1-甲基丙酯	2368	2382	2413	4-硝基苯甲酸-2-丙炔酯	2644	2661	2672
4-硝基苯甲酸-2-甲基丙酯	2409	2424	2454	4-硝基苯甲酸-3-丁烯酯	2529	2547	2570
4-硝基苯甲酸-1,2-二甲基丙酯	2425	2440	2465	4-硝基苯甲酸-1-甲基-3-丁烯酯	2498	2511	2538
4-硝基苯甲酸-1-甲基丁酯	2448	2463	2490	4-硝基苯甲酸-反-2-丁烯酯	2569	2586	2606
4-硝基苯甲酸-3-甲基丁酯	2526	2547	2567	4-硝基苯甲酸-4-戊烯酯	2642	2662	2684
3,5-二硝基苯甲酸甲基乙酯	2738	2759	2781	4-硝基苯甲酸-反-3-己烯酯	2701	2718	2739
3,5-二硝基苯甲酸-1-甲基丙酯	2748	2764	2785	4-硝基苯甲酸-顺-3-己烯酯	2725	2745	2768
3,5-二硝基苯甲酸-2-甲基丙酯	2788	2804	2825	3,5-二硝基苯甲酸-2-丙烯酯	2863	2879	2900
3,5-二硝基苯甲酸-1,2-二甲基丙酯	2790	2805	2827	3,5-二硝基苯甲酸-2-丙炔酯	3094	3105	3125
3,5-二硝基苯甲酸-1-甲基丁酯	2818	2834	2855	3,5-二硝基苯甲酸-3-丁烯酯	2935	2953	2974
3,5-二硝基苯甲酸-3-甲基丁酯	2913	2934	2954	3,5-二硝基苯甲酸-1-甲基-3-丁烯酯	2866	2883	2905
苯甲酸-2-丙烯酯	1834	—		3,5-二硝基苯甲酸-反-2-丁烯酯	2972	2989	3009
苯甲酸-2-丙炔酯	2003	—		3,5-二硝基苯甲酸-4-戊烯酯	3042	3060	3085

续表

I 柱温/℃ 化合物	180	200	220	I 柱温/℃ 化合物	180	200	220
3,5-二硝基苯甲酸-反-3-己烯酯	3084	3104	3125	4-硝基苯甲酸乙酯	2307	2326	2351
3,5-二硝基苯甲酸-顺-3-己烯酯	3117	3134	3158	4-硝基苯甲酸-2-氯乙酯	2808	2831	2860
苯甲酸乙酯	1693	1689	1705	4-硝基苯甲酸-2,2-二氯乙酯	2913	2938	2965
苯甲酸-2-氯乙酯	2137	2137	2159	4-硝基苯甲酸-2,2,2-三氯乙酯	2847	2873	2904
苯甲酸-2,2-二氯乙酯	2226	2231	2267	3,5-二硝基苯甲酸乙酯	2753	2774	2792
苯甲酸-2,2,3-三氯乙酯	2199	2205	2239				

第二节 胺类化合物的保留指数

表 15-10 烷基胺保留指数（一）[5]

柱温：100℃

I 固定液 化合物	Apiezon	Triton X-305	PEG-1000	N,N,N',N'-四(2-羟乙基)乙二胺+PEG-1000	I 固定液 化合物	Apiezon	Triton X-305	PEG-1000	N,N,N',N'-四(2-羟乙基)乙二胺+PEG-1000
甲胺	380	665	720	838	二乙胺	560	713	782	882
乙胺	458	648	748	878	二丙胺	748	874	935	1000
丙胺	512	755	851	971	二丁胺	947	1067	1128	1187
丁胺	643	855	955	1070	二戊胺	1145	1267	1328	1375
戊胺	743	955	1059	1169	三甲胺	422	508	566	648
己胺	839	1055	1160	1265	三乙胺	676	748	775	827
庚烷	942	1155	1261	1359	三丙胺	917	952	964	975
辛胺	1041	1255	1362	1453	三丁胺	1166	1206	1220	1232
二甲胺	434	607	692	812	三戊胺	1427	1468	1478	1490

表 15-11 烷基胺保留指数（二）[5]

柱温：100℃

I 固定液 化合物	Apiezon L	Triton X-305	PEG-1000	I 固定液 化合物	Apiezon L	Triton X-305	PEG 1000
甲胺	202.5	311.5	346.0	联丙烯胺	727	961	1047
乙胺	278.5	359.0	391.5	异丙基异丁胺	746	844	876
正丙胺	373.0	435.5	468.5	异丙基叔丁胺	696	770	807
异丙胺	322.0	373.0	396.0	异丙基异戊胺	853	963	1010
正丁胺	473.5	533.5	564.0	异丁基仲丁胺	843	925	959
异丁胺	425.0	468.5	486.5	异丁基叔丁胺	787	859	889
仲丁胺	418.5	458.0	474.0	异丁基异戊胺	957	1060	1100
正戊胺	572.5	633.5	664.0	烯丙基异戊胺	900	1071	1143
异戊胺	532.5	592.0	618.5	环己基异丙胺	1022	1150	1218
烯丙胺	363.5	480.5	523.5	环己基异丁胺	1135	1253	1310
正己胺	672.5	733.5	764.0	环己基异戊胺	1244	1381	1452
正庚胺	772.5	833.5	864.0	甲基-(1-甲基-正丁基)胺	738	884	948
正辛胺	872.5	933.5	964.0	甲基-(1-甲基-正戊基)胺	833	978	1047
二异丙胺	644	747	792	甲基-(1-甲基-正庚基)胺	1033	1174	1245
二正丙胺	746	871	937	乙基-(1-甲基-正戊基)胺	890	1007	1062
二仲丁胺	837	916	948	乙基-(1-甲基-正庚基)胺	1083	1200	1257
二异丁胺	850	937	973	正丙基-(1-甲基-正戊基)胺	977	1089	1129
二异戊胺	1055	1181	1237	正丙基-(1-甲基-正庚基)胺	1170	1281	1322

表 15-12 烷基胺保留指数（三）[2]

固定液：聚乙烯亚胺 2500　　柱温：100℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
乙胺	682	戊胺	975	异丙胺	654
丙胺	759	己胺	1085	异戊胺	929
丁胺	865	异丁胺	796		

表 15-13 烷基胺保留指数（四）[38]

固定液：$C_{78}H_{158}+C_{77}H_{155}OH$　　柱温：130℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
丁胺	610.4	二乙胺	555.8	三丙胺	918.5
戊胺	713.8	二丙胺	743.6	环己胺	863.2
己胺	815.6	二丁胺	943.0	苯胺	939.4
庚胺	917.5	三乙胺	676.4		

表 15-14 烷基胺保留指数（五）[4]

固定液：$C_{78}H_{158}$　　柱温：130℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
硝基乙烷	567.8	1-氰基丙烷	587.9	己胺	813.4
1-硝基丙烷	661.9	1-氰基丁烷	693.6	二乙胺	518.9
1-硝基丁烷	765.2	1-氰基戊烷	795.5	二丙胺	742.6
1-硝基戊烷	867.0	丁胺	609.4	三乙胺	673.6
氰基乙烷	189.2	戊胺	711.8	硝基苯	1048.2

表 15-15 叔胺保留指数[1]

柱温：100℃

化合物 \ 固定液 I	Apiezon L+KOH	Amine 220+Na_3PO_4	Triton X-305+Na_3PO_4	PEG-1000+Na_3PO_4	化合物 \ 固定液 I	Apiezon L+KOH	Amine 220+Na_3PO_4	Triton X-305+Na_3PO_4	PEG-1000+Na_3PO_4
二甲基异丙胺	607	665	706	753	二乙基正丁胺	846	879	903	931
二甲基正丙胺	597	641	686	722	二乙基异戊胺	902	932	957	976
二甲基叔丁胺	693	744	788	832	二乙基正戊胺	941	973	997	1024
二甲基仲丁胺	700	744	782	820	二乙基环己胺	1111	1149	1191	1231
二甲基异丁胺	637	670	701	730	二乙基正己胺	1038	1070	1094	1119
二甲基正丁胺	696	739	781	816	二丙基异丙胺	906	923	940	952
二甲基异戊胺	754	793	833	866	三丙基胺	915	936	951	964
二甲基正戊胺	795	840	878	915	二丙基叔丁胺	972	986	1006	1014
二甲基环己胺	995	1059	1124	1183	二丙基仲丁胺	994	1007	1025	1031
二甲基正己胺	893	939	975	1013	二丙基异丁胺	961	971	982	986
二乙基异丙胺	742	769	793	829	二丙基正丁胺	1001	1022	1039	1051
二乙基正丙胺	751	787	809	840	二丙基异戊胺	1053	1069	1087	1096
二乙基叔丁胺	811	836	857	874	二丙基正戊胺	1093	1112	1129	1141
二乙基仲丁胺	827	847	868	879	二丙基环己胺	1267	1293	1327	1353
二乙基异丁胺	793	812	829	835					

表 15-16　烷基苯胺保留指数[3]

固定液 I　柱温/℃ 化合物	聚己二酸丙二醇酯 114	1-羟基-2-十七碳烯基咪唑啉 130	固定液 I　柱温/℃ 化合物	聚己二酸丙二醇酯 114	1-羟基-2-十七碳烯基咪唑啉 130
N,N'-二甲基苯胺	1371	1268	3-甲苯胺	1610	1408
N,N'-二乙苯胺	1445	1368	2,5-二甲苯胺	1653	1470
N-甲基苯胺	1506	1352	3,5-二甲苯胺	1691	1497
苯　胺	1525	1320	喹　啉	1670	1530
2-甲苯胺	1576	1385	3,4-二甲苯胺	1711	1517
4-甲苯胺	1589	1395	异喹啉	1703	1567

表 15-17　苯胺保留指数（一）[4]

固定液	PEG-1500		SE-30		固定液	PEG-1500		SE-30	
I　柱温/℃ 化合物	130	150	110	130	I　柱温/℃ 化合物	130	150	110	130
苯　胺	1800	1816	968	972	邻乙烯基苯胺	—	2022	1154	—
邻甲苯胺	1846	1866	1060	1069	对乙烯基苯胺		2124	1182	
对甲苯胺	1864	1883	1064	—	间乙烯基苯胺	—	2162	1197	—
间甲苯胺	—	1920	1076	—	N-甲基苯胺	1769	1788	1060	—
邻乙苯胺	1902	1921	1138	1149	N-乙基苯胺	1771	1789	1119	—
对乙苯胺		1973	1152		N,N-二甲基苯胺	1608	1634	1086	—
间乙苯胺	—	1990	1157	—	N,N-二乙基苯胺	1670	1688	1215	—

表 15-18　苯胺保留指数（二）[5]

柱温：125℃

I　固定液 化合物	Apiezon L	PEGS	I　固定液 化合物	Apiezon L	PEGS
苯	699	1184	N,N-二甲基苯胺	1134	1828
环己烷	700	842	N-甲基邻甲苯胺	1194	2033
苯　胺	1011	2033	N,N-二甲基邻甲苯胺	1235	1880
邻甲苯胺	1093	2090	N-甲基环己胺	1096	1644
N-甲基苯胺	1096	1994			

表 15-19　有机碱保留指数[35]

柱温：100℃

I　固定液 化合物	Apiezon L① +KOH	Apiezon L① +KF	Apiezon L① $+Na_3PO_4$	I　固定液 化合物	Apiezon L① +KOH	Apiezon L① +KF	Apiezon L① $+Na_3PO_4$
吡啶	750	748	784	己　胺	841	840	884
二乙胺	683	686	711	N-甲基己胺	884	882	924
N,N-二甲基己胺	895	896	915	二丙胺	750	749	789
二丙基乙胺	838	838	842	二丁胺	919	948	978
三丙胺	918	917	923	苯胺	970	968	1030
N,N-二甲基苯胺	1095	1096	1096	N-甲基苯胺	1063	1061	1086

① Apiezon L 经过加氢。

表 15-20 苯胺衍生物保留指数[1]

固定液：OS-138　　柱温：180℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
2,3-二氯亚硫酰基苯胺	1876	3,4-二氯亚硫酰基苯胺	1855	2,5-二氯苯胺	1717
2,4-二氯亚硫酰基苯胺	1844	3,5-二氯亚硫酰基苯胺	1803	2,3-二氯苯胺	1746
2,5-二氯亚硫酰基苯胺	1836	2,6-二氯苯胺	1601	3,5-二氯苯胺	1813
2,6-二氯亚硫酰基苯胺	1764	2,4-二氯苯胺	1717		

表 15-21 亚硝胺保留指数[4]

固定液	SE 30	Ucon LB 550X+KOH	固定液	SE-30	Ucon LB-550X+KOH
柱温/℃ I / 化合物	125	130	柱温/℃ I / 化合物	125	130
二甲基亚硝胺	631	1050	正戊基丁基亚硝胺	1223	1558
二乙基亚硝胺	726	1165	正戊基正丁基亚硝胺	1242	1579
二异丙基亚硝胺	866	1257	二异戊基亚硝胺	1262	1566
正丙基异丙基亚硝胺	934	1265	正戊基异戊基亚硝胺	1334	1630
二正丙基亚硝胺	955	1325	二正戊基亚硝胺	1409	1690
乙基丁基亚硝胺	1000	1347	二正己基亚硝胺	1649	1937
二异丁基亚硝胺	1132	1379	亚硝基吗啉	902	—
仲丁基正丁基亚硝胺	1097	1463	亚硝基哌啶	980	—
二正丁基亚硝胺	1138	1491	苯基正丁基亚硝胺	1180	—
正戊基乙基亚硝胺	1026	1441	环己基甲基亚硝胺	1189	—
正戊基异丙基亚硝胺	1106	1482	苯甲基亚硝胺	1324	—
正戊基正丙基亚硝胺	1149	1515			

表 15-22 二胺保留指数[3]

固定液：28%Pennwalt 223+4% KOH　　柱温：170℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
乙二胺	771.7	2,3-二氨基丁烷	873.6	1,4-二氨基丁烷	999.3
N-甲基乙二胺	815.6	1,3-二氨基丙烷	890.8	1,5-二氨基戊烷	1100.8
1,2-二氨基丙烷	819.5	N,N-二甲基-1,3-二氨丙烷	919.0	二亚乙基三胺	1183.7
1,2-二氨基-2-甲基丙烷	843.7	N-甲基-1,3-二氨丙烷	928.0	1,2-二氨基环己烷	1191.1
对称-二甲基乙二胺	851.4	1,3-二氨基丁烷	929.6		

第三节 氮苯化合物的保留指数

表 15-23 烷基吡啶保留指数（一）[5]

固定液	聚己二酸丙二醇酯	1-羟基-2-十七碳烯基咪唑啉	固定液	聚己二酸丙二醇酯	1-羟基-2-十七碳烯基咪唑啉
柱温/℃ I / 化合物	58	77	柱温/℃ I / 化合物	58	77
吡　啶	1086	916	3-乙基吡啶	—	—
2-甲基吡啶	1124	980	2,3,6-三甲基吡啶	1283	1148
2,6-二甲基吡啶	1159	1027	4-乙基吡啶	—	—
2-乙基吡啶	1185	1066	2,5-二甲基-6-异丙基吡啶	—	—
2-甲基-6-乙基吡啶	1207	1077	2,4-二甲基-6-乙基吡啶	—	—
3-甲基吡啶	1195	1040	3,5-二甲基吡啶	1299	1158
4-甲基吡啶	1202	1047	2-甲基-4-乙基吡啶	—	—
2,5-二甲基吡啶	1228	1092	3,4-二甲基吡啶	1346	1193
2,4-二甲基吡啶	1237	1101	2,3,5-三甲基吡啶	1355	1225
2,3-二甲基吡啶	1255	1110	2,4,5-三甲基吡啶	1376	1260
2,4,6-三甲基吡啶	1274	1142	2,3,4-三甲基吡啶	1406	1266

表 15-24　烷基吡啶保留指数（二）[32]

固定液：Apiezon L—Na_3PO_4

化合物 \ 柱温/℃ \ I	80	130	化合物 \ 柱温/℃ \ I	80	130
吡啶	808	758	4-甲基吡啶	932	886
2-甲基吡啶	871	832	3-乙基吡啶	1011	973

表 15-25　烷基吡啶保留指数（三）[illegible]

柱温：150℃

化合物 \ 固定液 \ I	SE-30	PEG-1500	化合物 \ 固定液 \ I	SE-30	PEG-1500
吡啶	756	1255	4-正戊基吡啶	1265	1741
2-甲基吡啶	823	1280	4-(1-乙基丁基)吡啶	1317	1767
2-乙基吡啶	915	1343	2,6-二甲基吡啶	882	1301
2-正丁基吡啶	1095	1519	2,5-二甲基吡啶	936	1392
2-(2-甲基丁基)吡啶	1155	1559	2,4-二甲基吡啶	933	1403
2-正戊基吡啶	1192	1616	2,3-二甲基吡啶	953	1426
2-(4-甲基戊基)吡啶	1255	1664	3,5-二甲基吡啶	987	1487
3-甲基吡啶	872	1370	3,4-二甲基吡啶	1014	1548
4-甲基吡啶	876	1383	2-甲基-6-乙基吡啶	962	1346
4-乙基吡啶	980	1468	2-甲基-5-乙基吡啶	1029	1476
4-异丙基吡啶	1034	1513	2-甲基-4-乙基吡啶	1033	1488
4-正丙基吡啶	1067	1549	2-正戊基-6-甲基吡啶	1249	1617
4-异丁基吡啶	1105	1568	2-异戊基-5-甲基吡啶	1267	1677
4-(2-甲基丙基)吡啶	1122	1579	2,4,6-三甲基吡啶	1004	1428
4-(1-甲基丙基)吡啶	1128	1592	2,3,5-三甲基吡啶	1060	1539
4-正丁基吡啶	1218	1673	2,4,5-三甲基吡啶	1071	1560
4-(1-甲基丁基)吡啶	1167	1647	3,4,5-三甲基吡啶	1164	1737
4-(2-甲基丁基)吡啶	1229	1689			

表 15-26　烷基吡啶保留指数（四）[35]

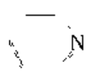
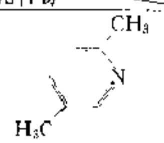
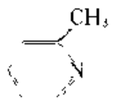
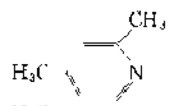
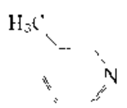
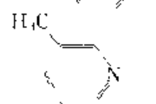
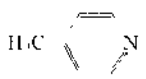
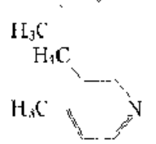
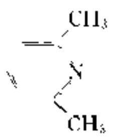
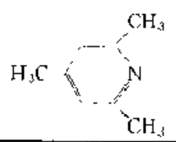
固定液	SE-30		PEG-40M+KF		固定液	SE-30		PEG-40M+KF	
化合物 \ 柱温/℃ \ I	80	110	80	110	化合物 \ 柱温/℃ \ I	80	110	80	110
	732	738	1180	1195		912	917	1313	1330
	800	804	1212	1225		912	917	1322	1340
	845	852	1284	1303		957	965	1390	1414
	845	852	1289	1309		982	992	1441	1469
	866	869	1243	1253		972	976	1353	1368

表 15-27 烷基吡啶保留指数（五）[10]

固定液：$C_{87}H_{176}$

柱温/℃	70	130	190	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	柱温/℃	70	130	190	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
保留指数 / 化合物	I				保留指数 / 化合物	I			
吡啶	705.9	728.3	750.7	3.73	2,5 二甲基吡啶	903.2	922.3	941.4	3.18
2 皮考啉	786.6	805.1	824.8	3.23	2,6-二甲基吡啶	863.8	876.1	888.4	2.05
3 皮考啉	826.8	848.0	869.2	3.54	3,4-二甲基吡啶		992.3	1018.6	4.38
4-皮考啉	823.2	846.7	870.2	3.91	3,5 二甲基吡啶	—	967.7	991.6	3.99
2-乙基吡啶	871.8	890.2	908.6	3.03	2-丙基吡啶	—	976.6	998.3	3.62
3-乙基吡啶	918.0	941.7	965.4	3.95	4-丙基吡啶	—	1034.7	1061.1	4.40
4-乙基吡啶	921.4	945.9	970.4	4.08	4-叔丁基吡啶	—	1073.3	1101.9	4.76
2,4-二甲基吡啶	903.4	922.7	942.0	3.22					

表 15-28 烷基吡啶保留指数（六）[38]

固定液：$C_{78}H_{158}+C_{77}H_{155}OH$　　柱温：130 ℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
吡啶	725.5	2,5-二甲基吡啶	921.3	4-乙基吡啶	943.4
2 皮考啉	803.4	2,6-二甲基吡啶	873.8	2-丙基吡啶	976.8
3 皮考啉	846.0	3,4-二甲基吡啶	988.1	4 丙基吡啶	1033.6
4 皮考啉	845.[illegible]	3,5-二甲基吡啶	966.1	均 可力丁	988.2
2,3 二甲基吡啶	936.6	2-乙基吡啶	888.5	2,3,6-可力丁	1002.2
2,4 二甲基吡啶	921.8	3-乙基吡啶	928.9	4-叔丁基吡啶	1069.8

表 15-29 烷基吡啶保留指数（七）[41]

固定液：$C_{78}H_{158}$　　柱温：130 ℃

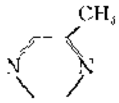
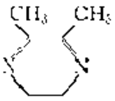
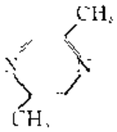
化合物	I	化合物	I	化合物	I
吡啶	723.4	2,6-二甲基吡啶	870.1	4-丙基吡啶	1032.3
2 皮考啉	802.2	3,4-二甲基吡啶	982.8	2,3,6-可力丁	1000.5
3-皮考啉	843.4	3,5 二甲基吡啶	961.4	2,4,6-可力丁	986.6
4-皮考啉	843.1	2-乙基吡啶	886.9	4-叔丁基吡啶	1067.3
2,3-二甲基吡啶	933.9	3-乙基吡啶	938.6	3-氯吡啶	885.0
2,4 二甲基吡啶	919.5	4-乙基吡啶	941.1	四氢化吡咯	674.9
2,5-二甲基吡啶	920.0	2-丙基吡啶	976.5	哌啶	762.0

表 15-30 胺与吡啶的保留指数[12]

柱温：100 ℃

I 固定液 / 化合物	Apiezon L－KOH	Amine 220＋Na_3PO_4	Triton X-305＋Na_3PO_4	PEG-1000－Na_3PO_4	I 固定液 / 化合物	Apiezon L－KOH	Amine 220＋Na_3PO_4	Triton X-305＋Na_3PO_4	PEG-1000－Na_3PO_4
异丙胺	477	588	665	760	γ-甲基吡啶	857	1050	1218	1342
异丁胺	581	713	800	893	α,γ-二甲基吡啶	932	1103	1256	1375
异戊胺	698	830	923	1011	α,α'-二甲基吡啶	880	1018	1216	1285
二异丙胺	641	701	737	782	γ-乙基吡啶	958	1147	1304	1427
二异丁胺	849	896	933	971	吡咯烷	690	863	957	1065
吡啶	734	918	1102	1227	哌啶	770	908	1003	1100
α-甲基吡啶	811	974	1141	1259	N 甲基哌啶	779	845	905	963
β 甲基吡啶	856	1044	1210	1334	N 乙基哌啶	858	913	972	1023

表 15-31 甲基吡嗪保留指数（一）[34]

固定液	OV-101		OV-17		PEG-40M	
I / 柱温/℃ / 化合物	80	110	80	110	80	110
	772	773	909	917	1206	1216
	849	852	988	995	1257	1268
	936	941	1079	1088	1330	1344
	926	930	1066	1073	1308	1321

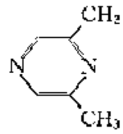
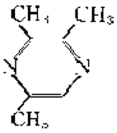
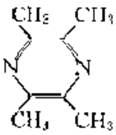
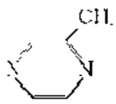
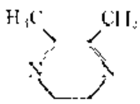
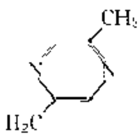
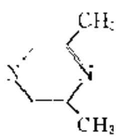
固定液	OV-101		OV-17		PEG-40M	
I / 柱温/℃ / 化合物	80	110	80	110	80	110
	926	930	1071	1079	1314	1327
	1012	1016	1157	1166	1381	1396
	1091	1096	1236	1246	1449	1162

表 15-32 甲基吡嗪保留指数（二）[35]

固定液	SE-30		PEG-40M+KF	
I / 柱温/℃ / 化合物	80	110	80	100
	772	773	1206	1216
	849	852	1257	1268
	936	941	1330	1344
	926	930	1308	1321
	926	930	1314	1327

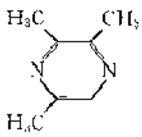
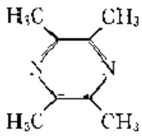
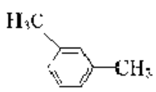
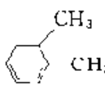
固定液	SE-30		PEG-40M+KF	
I / 柱温/℃ / 化合物	80	110	80	100
	1012	1016	1381	1396
	1091	1096	1449	1462
	661	652	952	963
	862	858	1145	1157
	885	893	1185	1200

表 15-33　吡嗪与哌嗪的保留指数[14]

柱温：100℃

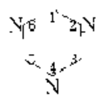
化合物 \ 固定液 I	Apiezon L	Triton X-305	PEG 1000	化合物 \ 固定液 I	Apiezon L	Triton X-305	PEG-1000
吡嗪	721	1125	1252	2-甲氧基-3-丙基吡嗪	1110	1414	1518
2,3-二甲基吡嗪	919	1263	1385	2-甲基巯基-3-丙基吡嗪	1323	1672	1789
2,5-二甲基吡嗪	911	1242	1360	2-甲氧基-3-异丁基吡嗪	1147	1438	1535
2,6-二甲基吡嗪	909	1248	1365	哌嗪	874	1279	1458
三甲基吡嗪	977	1306	1412	*N*-甲基哌嗪	866	1166	1306
四甲基吡嗪	1088	1389	1503	*N*,*N*-二甲基哌嗪	870	1063	1159
2,5-二甲基-3,6-二乙基吡嗪	1216	1468	1564	2-甲基哌嗪	907	1279	1449
甲氧基吡嗪	883	1248	1367	反-2,5-二甲基哌嗪	952	1279	1436
2-甲氧基-3-甲基吡嗪	957	1286	1396	吡啶	734	1102	1227
2-甲基巯基-3-甲基吡嗪	1173	1545	1670	2,6-二甲基吡啶	880	1216	1285
2-甲氧基-3-乙基吡嗪	1030	1343	1446	哌啶	770	1003	1100

表 15-34　2，4，6-三烷氧基-1，3，5-三嗪保留指数[6]

固定液：甲基乙烯基硅酮树脂（UCCW982）

化合物 \ 柱温/℃ I	200	250	化合物 \ 柱温/℃ I	200	250
2,4,6-三正丙氧基-1,3,5-三嗪	1818	1728	2,4,6-三(仲丁氧基)-1,3,5-三嗪	1842	1884
2,4,6-三正丁氧基-1,3,5-三嗪	2125	2170	2,4,6-三(3-甲基丁氧基)-1,3,5-三嗪	2249	2370
2,4,6-三正戊氧基-1,3,5-三嗪	2430	2529	2,4,6-三(2-乙基丁氧基)-1,3,5-三嗪	2496	2620
2,4,6-三正己氧基-1,3,5-三嗪	2730	2941	2,4,6-三(2,2-二甲基丁氧基)-1,3,5-三嗪	2290	2400
2,4,6-三正庚氧基-1,3,5-三嗪		3334	2,4,6-三(2-乙基己氧基)-1,3,5-三嗪	—	3213
2,4,6-三正辛氧基-1,3,5-三嗪		3639	2,4,6-三(2,2,4-三甲基戊氧基)-1,3,5-三嗪	2662	2837
2,4,6-三正壬氧基-1,3,5-三嗪	—	4109	2,4,6-三(2,2-二甲基己氧基)-1,3,5-三嗪	2768	3030
2,4,6-三(2-甲基丙氧基)-1,3,5-三嗪	1916	1933	2,4,6-三(3,5,5-三甲基己氧基)-1,3,5-三嗪		3520

表 15-35　均三嗪衍生物保留指数[13]



固定液			Carbowax 20M	Versamid 900	SE-30—Reoplex 400
化合物 \ 柱温/℃ I			215	195	195
2-取代基	4-取代基	6-取代基			
Cl	NH_2	NHtBu	2336	-	1766
Cl	$N(Et)_2$	NHiPr	2461	2142	1907
Cl	NHtBu	NHtBu	2501	2185	1938
Cl	NHEt	$N(Et)_2$	2557	2196	1932
Cl	NHiPr	NHiPr	2633	2262	1973
Cl	NHEt	NHtBu	2664	2288	1999
Cl	NHEt	NHiPr	2722	2318	2023
Cl	NHEt	NHEt	2806	2375	2078
OCH_3	NHiPr	NHiPr	2539	2199	1916
OCH_3	NHtBu	NHEt	2570	2205	1938
OCH_3	NHEt	NHsecBu	2676	2302	2015
OCH_3	NHEt	NHEt	2680	2270	1990
SCH_3	NHiPr	NHiPr	2758	2378	2099
SCH_3	NHEt	NHtBu	2793	2403	2122
SCH_3	NHEt	NHiPr	2837	2418	2139
SCH_3	NHMe	NHiPr	2868	2452	2141
SCH_3	NHEt	NHEt	2915	2465	2185
SCH_3	NHiPr	$NH(CH_2)_3OMe$	3202	2726	2457

表 15-36 氯或甲硫基均三嗪保留指数 (一)[15]

柱温：190℃

固定液 / 化合物 \ 保留指数	Carbowax 20M		OV-101	
	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
2-氯-4-二乙氨基-6-异丙氨基均三嗪	2475.1	9.3	1763.3	3.3
2-氯-4,6-双(叔丁氨基)均三嗪	2518.4	7.3	1781.4	3.5
2-氯-4-二乙氨基-6-乙氨基均三嗪	2559.3	10.4	1760.5	2.8
2-氯-4,6-双(异丙氨基)均三嗪	2659.1	7.5	1733.1	2.3
2-氯-4-乙氨基-6-叔丁氨基均三嗪	2686.1	9.3	1754.2	3.5
2-氯-4-乙氨基-6-异丙氨基均三嗪	2747.3	9.3	1726.5	4.7
2-氯-4,6-双(乙氨基)均三嗪	2833.9	10.7	1723.2	2.1
2-甲氧基-4,6-双(异丙氨基)均三嗪	2570.3	6.[illegible]	—	—
2-甲氧基-4-乙氨基-6-叔丁氨基均三嗪	2597.9	7.7	—	—
2-甲氧基-4-乙氨基-6-异丙氨基均三嗪	2633.4	7.2	—	—
2-甲氧基-4-乙氨基-6-异丁氨基均三嗪	2707.8	7.6	—	—
2-甲氧基-4,6-双(乙氨基)均三嗪	2714.1	9.0	—	—
2-甲硫基-4,6-双(异丙氨基)均三嗪	2779.6	9.6	1887.7	1.7
2-甲硫基-4-乙氨基-6-叔丁氨基均三嗪	2812.1	11.4	1912.5	4.2
2-甲硫基-4-乙氨基-6-异丙氨基均三嗪	2859.3	11.3	1882.5	4.0
2-甲硫基-4-甲氨基-6-异丙氨基均三嗪	2888.9	13.0	1817.9	1.6
2-甲硫基-4,6-双(乙氨基)均三嗪	2937.1	13.1	1878.1	4.2

表 15-37 氯或甲硫基均三嗪保留指数 (二)[15]

固定液	Carbowax 20M	XE-60	Versamid 900	SE-30—Reoplex 400(5 : 2)
化合物 / I \ 柱温/℃	215	195	195	195
2-氯-4-二乙氨基-6-异丙氨基均三嗪	2451	2378	2142	1907
2-氯-4-二乙氨基-6-乙氨基均三嗪	2557	2115	2196	1932
2-氯-4,6-双(异丙氨基)均三嗪	2633	2162	2262	1973
2-氯-4-乙氨基-6-叔丁氨基均三嗪	2661	2504	2288	1999
2-氯-4-乙氨基-6-异丙氨基均三嗪	2722	2509	2318	2023
2-氯-4,6-双(乙氨基)均三嗪	2806	2553	2375	2078
2-甲氧基-4-乙氨基-6-异丙氨基均三嗪	26[illegible]0	2418	2212	1972
2-甲氧基-4,6-双(乙氨基)均三嗪	2680	2435	2270	1990
2-甲硫基-4,6-双(异丙氨基)均三嗪	2758	2558	2378	2099
2-甲硫基-4-乙氨基-6-叔丁氨基均三嗪	2793	2608	2403	2122
2-甲硫基-4-乙氨基-6-异丙氨基均三嗪	2837	2610	2418	2139
2-甲硫基-4-甲氨基-6-异丙氨基均三嗪	2868	2623	2452	2141
2-甲硫基-4,6-双(乙氨基)均三嗪	2915	2656	2465	2185

第四节 多环含氮化合物的保留指数

表 15-38 烷基喹啉保留指数[33]

固定液	OV 101					Ucon LB-550-X			PEG 20M		
柱温/℃	140	160	180	200	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	140	160	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	140	160	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
化合物 \ 保留指数	I					I			I		
喹啉	1231	1246	1261	1277	7.7	1460	1178	9.0	1897	1924	13.5
异喹啉	1251	1269	1283	1304	8.8	1485	1503	9.0	1934	1958	12.0
2-甲基喹啉	1294	1308	1322	1336	7.0	1512	1527	7.5	1921	1946	11.0
8-甲基喹啉	1304	1319	1331	1349	7.5	1512	1527	7.5	1916	1943	13.5
7-甲基喹啉	1338	1354	1368	1385	7.8	1563	1581	9.0	1995	2020	12.5
6-甲基喹啉	1343	1358	1369	1387	7.3	1564	1582	9.0	1995	2020	12.5
3-甲基喹啉	1346	1361	1375	1390	7.3	1572	1590	9.0	2014	2042	14.0
5-甲基喹啉	1355	1375	1394	1412	9.5	1588	1609	10.5	2025	2054	14.5
4-甲基喹啉	1357	1376	1395	1413	9.3	1593	1615	11.0	2037	2065	14.0
2-乙基喹啉	1374	1388	1402	1416	7.0	1570	1587	8.5	1970	1993	11.5
2,8-二甲基喹啉	1361	1371	1387	1400	6.5	1549	1563	7.0	1921	1945	12.0
2,7-二甲基喹啉	1400	1415	1423	1445	7.5	1614	1628	7.0	2018	2044	13.0
2,6-二甲基喹啉	1397	1414	1423	1445	8.0	1616	1631	7.5	2019	2044	12.5
6,8-二甲基喹啉	1408	1422	1436	1450	7.0	1615	1630	7.5	2013	2037	12.0
5,8-二甲基喹啉	1427	1442	1457	1473	7.8	1631	1651	8.5	2038	2065	13.5
2,4-二甲基喹啉	1417	1434	1449	1467	8.3	1644	1660	8.0	2063	2088	12.5
2,3-二甲基喹啉	1427	1443	1459	1474	7.8	1645	1666	10.5	2065	2090	12.0
1,6-二甲基喹啉	1472	1487	1499	1517	7.5	1698	1712	7.0	2133	2159	13.0
2,6,8-三甲基喹啉	1461	1475	1489	1502	6.8	1653	1567	7.0	2018	2042	12.0
2,4,6-三甲基喹啉	1525	1539	1550	1567	7.0	1744	1758	7.0	2155	2180	12.0
2-丙基喹啉	1458	1472	1488	1500	7.0	1653	1367	7.0	2040	2064	12.0
2-异丁基喹啉	1501	1515	1528	1543	7.0	1683	1597	7.0	2048	2077	14.5
2-戊基喹啉	1650	1664	1675	1691	7.0	1854	1373	9.5	2225	2249	12.0
8-甲基-5-异丙基喹啉	1560	1571	1590	1601	6.8	1764	1777	6.5	2135	2164	14.5
3-乙基-2-正丙基喹啉	1644	1657	1670	1682	6.3	1857	1364	6.5	2208	2236	14.0
2-甲基-3-正丁基喹啉	1695	1708	1719	1734	6.5	1899	1915	8.0	2282	2309	13.5
3-丙基-2-正丁基喹啉	1803	1816	1825	1843	6.7	1947	1964	8.5	2329	2357	14.0

表 15-39 烷基喹啉与苯氧烷基吡啶保留指数[45]

柱温：220℃

化合物 \ 固定液 (I)	Versamide 900	SE-30	化合物 \ 固定液 (I)	Versamide 900	SE-30
喹啉	1706	1331	4-异丁基异喹啉	—	1654
2-甲基喹啉	1727	1364	4-仲丁基异喹啉	—	1667
8-甲基喹啉	1724	1368	4-丁基异喹啉	—	1705
6-甲基喹啉	1813	1445	1,4-二丁基异喹啉	—	1985
7-甲基喹啉	1815	1450	1,4-二戊基异喹啉	—	2150
4-甲基喹啉	1857	1465	1-丁基异喹啉	—	1636
2,8-二甲基喹啉	1747	1418	α-苯氧丙基吡啶	—	1815
2,6-二甲基喹啉	1828	1469	α-苯氧丁基吡啶	—	1911
2,4-二甲基喹啉	1868	1497	α-苯氧己基吡啶	—	2104
2-丙基喹啉	1870	—	α-(对甲基苯氧丙基)吡啶		1905
2-丁基喹啉	1949	1624	γ-苯氧丙基吡啶	—	1887
2-戊基喹啉	2029	—	γ-苯氧丁基吡啶		1985
2-(2-甲基丁基)喹啉	1982	—	γ-苯氧己基吡啶	—	2180
2-(4-甲基戊基)喹啉	2090	—	γ-(对甲基苯氧丙基)吡啶	—	1976
2-辛基喹啉	2259	—	α-苯乙基吡啶	—	1531
6-甲基-2-丁基喹啉	1986	—	α-苯丙基吡啶	—	1660
异喹啉	1741	1353	γ-苯乙基吡啶	—	1605
3-甲基异喹啉	1787	1388	γ-苯丙基吡啶	—	1725

表 15-40 烷基吡啶与喹啉的保留指数[20]

柱温：150℃

化合物 \ I \ 固定液	OV-101	PEG20M	化合物 \ I \ 固定液	OV-101	PEG20M
吡啶	744.6	1241.5	喹啉	1227.5	1918.1
2-甲基吡啶	814.0	1268.3	异喹啉	1248.4	1955.[illegible]
3-甲基吡啶	859.1	1354.3	2-甲基喹啉	1293.3	1942.1
4-甲基吡啶	862.7	1363.5	4-甲基喹啉	1356.7	2061.8
2,3-二甲基吡啶	940.3	1410.5	6-甲基喹啉	1334.6	2016.3
2,4-二甲基吡啶	923.9	1390.1	7-甲基喹啉	1334.2	2016.1
2,5-二甲基吡啶	925.9	1377.6	8-甲基喹啉	1304.0	1925.7
2,6-二甲基吡啶	875.8	1287.9	2,4-二甲基喹啉	1417.7	2084.[illegible]
3,4-二甲基吡啶	999.9	1528.3	2,6-二甲基喹啉	1399.0	2039.1
3,5-二甲基吡啶	972.4	1468.7	2,7-二甲基喹啉	1399.5	2037.3
2,4,6-三甲基吡啶	982.4	1409.1			

表 15-41 含氮杂环化合物保留指数[21]

柱温：220℃

化合物 \ I \ 固定液	PS 179	SE-30	聚苯醚六环	Carbowax 20M
喹啉	2182	1306	1719	2023
异喹啉	2241	1334	1762	2057
吲哚	2409	1324	1774	2449
吖啶	3222①	1869②	—	—
咔唑	3475①	1877②	—	

①柱温：260℃，②柱温：240℃。

表 15-42 吲哚保留指数[5]

固定液	SE-30		PEG-20M		固定液	SE-30		PEG-20M	
化合物 \ I \ 柱温/℃	170	190	170	190	化合物 \ I \ 柱温/℃	170	190	170	190
吲哚	1296	1310	2385	2420	3-甲基八氢吲哚	1217	1235	1415	1425
2-甲基吲哚	1386	1400	2425	2465	3-乙基八氢吲哚	1308	1326	1513	1523
3-甲基吲哚	1388	1402	2425	2465	*N*-甲基吲哚	1285	1301	1996	2016
5-甲基吲哚	1391	1402	2461	2493	*N*-乙基吲哚	1340	1356	2020	2036
7-甲基吲哚	1365	1384	2400	2430	*N*-正丙基吲哚	1431	1445	2086	2096
2,3-二甲基吲哚	1484	1499	2502	2539	*N*-甲基二氢吲哚	1230	1248	1756	1776
3-乙基吲哚	1479	1493	2509	2540	*N*-乙基二氢吲哚	1305	1322	1830	1844
二氢吲哚	1228	1244	1957	1976	*N*-正丙基二氢吲哚	1394	1403	1907	1916
3-甲基二氢吲哚	1330	1344	2037	2060	*N*-甲基八氢吲哚	1125	1145	1310	1320
3-乙基二氢吲哚	1427	1437	2136	2158	*N*-乙基八氢吲哚	1202	1220	1377	1394
八氢吲哚	1140	1150	1369	1374	*N*-正丙基八氢吲哚	1300	1317	1467	1477

表 15-43 吲哚与咔唑的保留指数[5]

固定液 柱温/℃ I 化合物	SE-30 190	SE-30 210	PEG-20M 190	PEG-20M 210	固定液 柱温/℃ I 化合物	SE-30 190	SE-30 210	PEG-20M 190	PEG-20M 210
5-羟基吲哚	1660	1702	—	—	N-正丁基咔唑	2024	2054	2834	2884
6-羟基吲哚	1654	1704	—	—	四氢咔唑	1809	1828	—	2979
6-羟基二氢吲哚	1544	1605			N-甲基四氢咔唑	1838	1863	2651	2709
6-甲氧基吲哚	1563	1574	2807	2826	N-乙基四氢咔唑	1857	1876	2617	2663
6-乙氧基吲哚	1632	1638	2842	2861	N-正丙基四氢咔唑	1928	1947	2657	2693
6-正丙氧基吲哚	1726	1732	2916	2928	N-正丁基四氢咔唑	2016	2035	2723	2772
6-异丙氧基吲哚	1649	1657	2800	2811	N-乙烯基咔唑	1882	1900	—	2838
6-甲氧基二氢吲哚	1503	1515	2384	2412	N-乙酰基吲哚	1530	1535	2438	2487
6-乙氧基二氢吲哚	1565	1572	2424	2434	N-乙酰基-2-甲基吲哚	1618	1626	2483	2535
6-正丙氧基二氢吲哚	1657	1669	2509	2516	N-乙酰基-3-甲基吲哚	1643	1654	2558	2617
6-异丙氧基二氢吲哚	1589	1595	2389	2399	N-乙酰基-2,3-二甲基吲哚	1223	1743	2595	2654
咔唑	1845	1866	—	3238	3-乙酰基吲哚	1875	1905	—	—
N-甲基咔唑	1837	1861	2755	2805	N,3-二乙酰基吲哚	1903	1927	—	—
N-乙基咔唑	1864	1884	2722	2769	N-乙酰基咔唑	2032	2066	—	3214
N-正丙基咔唑	1937	1958	2761	2810	N-乙酰基四氢咔唑	2031	2057	—	3076

表 15-44 9-烃基咔唑保留指数[27]

柱温：230℃

固定液 I 化合物	Apiezon L	OV-101	Carbowax 20M	固定液 I 化合物	Apiezon L	OV-101	Carbowax 20M
9-甲基咔唑	1439	1385	1534	9-庚基咔唑	1904	1901	1910
9-乙基咔唑	1431	1415	1463	9-乙烯咔唑	1477	1375	1522
9-丙基咔唑	1503	1500	1507	咔唑	1543	1390	2117
9-丁基咔唑	1602	1598	1600	9-异丙基咔唑	1458	1469	1458
9-戊基咔唑	1694	1700	1689	9-烯丙基咔唑	1487	1475	1586
9-己基咔唑	1795	1795	1795	9-苄基咔唑	2054	1971	2484

表 15-45 吡咯保留指数[5]

固定液 柱温/℃ I 化合物	SE-30 90	SE-30 110	PEG-20M 90	PEG-20M 110	固定液 柱温/℃ I 化合物	SE-30 90	SE-30 110	PEG-20M 90	PEG-20M 110
吡咯	733	740	1498	1502	N-甲基四氢吡咯	680	697	839	865
N-甲基吡咯	725	739	1148	1154	N-乙基四氢吡咯	761	774	906	930
N-乙基吡咯	796	811	1190	1197	N-正丙基四氢吡咯	847	857	987	1007
N-正丙基吡咯	879	889	1251	1258	N-正丁基四氢吡咯	944	954	1082	1102
N-正丁基吡咯	980	986	1342	1349	N-乙酰基吡咯	932	940	1532	1551
四氢吡咯	678	688	968	995					

表 15-46 吡啶并［1，2α］嘧啶衍生物保留指数[18]

柱温：240℃

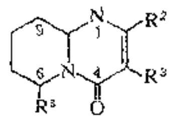
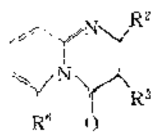
I 化合物 \ 固定液	R²	R³	R⁶	OV-1	OV-17
	—H	—H	—CH_3	1539	1960
	—H	—H	—H	1576	2000
	—H	—CH_3	—CH_3	1641	1996
	—CH_3	—H	—CH_3	1695	2032
	—CH_3	—C_2H_5	—CH_3	1764	2057
	—H	—C_2H_5	—CH_3	1800	2142
	—H	—CN	—CH_3	2000	2433
	—H	—$COOC_2H_5$	—CH_3	2088	2533
	—H	—$COOCH(CH_3)_2$	—CH_3	2101	2548
	—H	—$COOC_2H_5$	—H	2120	2616
	—H	—$COOC_3H_7$	—CH_3	2172	2638
	—H	—$CONH_2$	—CH_3	2183	2638
	—H	—$COOC_4H_9$	—CH_3	2269	2735
	—H	—$CONH_2$	—H	2270	2681
	—H	—C_6H_5	—CH_3	2305	2755
	—H	—$CH_2COOC_2H_5$	—CH_3	2080	2519
	—H	—CH_3	—H	1668	2051
	—CH_3	—H	—CH_3	1712	2065
	—H	—CH_3	—CH_3	1732	2080
	—CH_3	—C_2H_5	—CH_3	1812	2128
	—C_2H_5	—H	—CH_3	1830	2162
	—CH_3	—H	—C_2H_5	1834	2116
	—C_3H_7	—C_2H_5	—CH_3	1979	2285
	—H	—$COOC_2H_5$	—CH_3	2199	2639
	—H	—C_6H_5	—H	2347	2789
	—H	—C_6H_5	—CH_3	2396	2812

表 15-47 吡啶并嘧啶与吡咯并嘧啶保留指数[18]

柱温：240℃

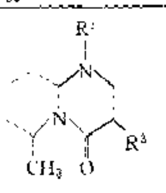
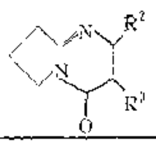
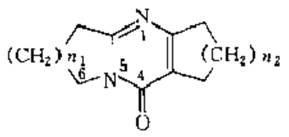
I 化合物 \ 固定液	R¹	R³	OV-1	OV-17
	—CH_3	—$CONH_2$	2477	2975
	—CH_3	—$COOC_2H_5$	2570	2958
	—C_2H_5	—$CONH_2$	2480	2963
	—C_4H_9	—$CONH_2$	2631	3071
	—$COCH_3$	—$COOC_2H_5$	2272	2746
	—H	—$COOC_2H_5$	1856	
	R²	**R³**		
	—H	—$COOC_2H_5$	2060	2523
	—H	—CN	1952	2187
	—H	—C_6H_5	2252	2783

表 15-48 含氮杂环化合物保留指数（一）[24]

固定液：OV-1　　柱温：220℃

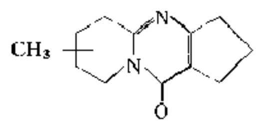
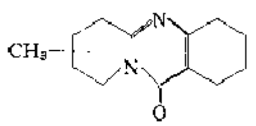


化合物	n_1	n_2	Δ①	*I*
	1	1	—	1870
	1	2	—	1973
	1	3	—	2050
	1	4	—	2117
	2	1	—	1961
	3	1	—	2003
	1	2	10,12	1958
	2	1	6,8	1968
	2	2	—	2059
	2	2	6,8	2064
	2	2	6,8,10,13	—
	3	2	—	2102
	3	2	12,14	2101
	3	3	—	2162
	4	4	—	2300
	4	2	—	2165

①Δ 表示 π 键的位置。

表 15-49 含氮杂环化合物保留指数（二）[24]

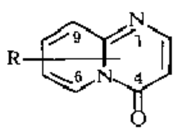
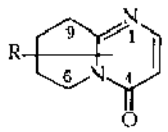
固定液：OV-1　　柱温：220℃

化合物	CH_3	Δ①	*I*
	6	6,8	2020
	7	6,8	2084
	8	6,8	2089
	9	6,8	2023
	6	—	1953
	7	—	1998
	8	-	2000
	9		1978
	6	6,8	2120
	7	6,8	2189
	8	6,8	2190
	9	6,8	2123
	6		2045
	7	—	2095
	8	—	2097
	9	..	2071

①Δ 表示 π 键的位置。

表 15-50 含氮杂环化合物保留指数（三）[24]

固定液：OV-1　　柱温：220℃

化合物	R	*I*
	2-Me	1648
	3-Me	1638
	6-Me	1636
	7-Me	1696
	8-Me	1703
	9-Me	1647
	2,6-Me_2	1707
	3,6-Me_2	1694
	2,3-Me_2	1227
	2-Et,6-Me	1788
	2 Me,6-Et	1751
	3-Et,6-Me	1766
	2-Me,3-Et,6-Me	1821
	2-Me,3-Pr	1854
	2-Et,3-Me,6-Me	1839
	2 Me,3-Pr,6 Me	1896
	2-Pr,3-Et,6-Me	1948
	2-Me,3-Et,6-Me,8-Me	1936
	3-Me	1637
	6-Me	1578
	2,3-Me_2	1726
	3,6-Me_2	1636
	2,6 Me_2	1656
	2-Me,3-Et,6-Me	1753

①Me——甲基；Et——乙基；Pr——丙基。

表 15-51　含氮杂环化合物保留指数（四）[31]

柱温：240℃

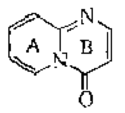
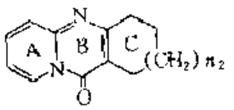
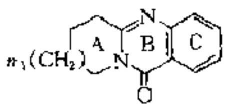
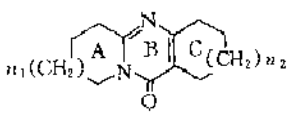
化合物	n_1	n_2	取代基	OV-1	OV-225
	-	—	—	1580	2124
		—	6-甲基	1636	2150
	-	—	2,3-二甲基	1727	2246
	—	-	2,9-二甲基	1714	2210
	-	--	3,6-二甲基	1694	2198
		0	6-甲基	2020	2865
		1	-	2064	2972
		1	6-甲基	2120	2947
		1	8-甲基	2190	3125
		1	9-甲基	2123	2951
	0		--	1958	2005
	1		-	2058	3048
	2		--	2101	3030
	2		13-甲基	—	3135
	0	0	--	1870	2875
	1	0	—	1961	2917
	1	0	6-甲基	1953	2820
	1	1	6-甲基	2045	2902
	1	1	8-甲基	2097	3011
	2	0	—	2003	2891
	2	1	—	2102	2984
	3	3	—	2300	3166

表 15-52　含氮化合物保留指数[22]

柱温：120℃

化合物 \ 固定液	Zonyl E7	PEG1540	三氰基乙氧基丙烷	聚苯醚六环	DEGS
1-硝基甲烷	1010	1169	1639	786	1402
1-硝基乙烷	1101	1184	1663	875	1423
1-硝基丙烷	1184	1245	1722	964	1493
2-甲基-2-硝基丙烷	1201	1138	1579	933	1356
3-硝基甲苯	1743	1826	2386	1521	2206
乙酰腈	962	1048	1508	701	1262
丁腈	1132	1144	1609	880	1352
戊腈	1251	1234	1695	987	1451
苯腈	1530	1643	2172	1298	1942
三甲基胺	700	584	973	476	1036
烯丙胺	784	377	1227	674	1327
2-氨基丁烷	828	870	1200	698	1318
吡咯	1123	1516	1961	1001	1762
吡啶	1155	1242	1668	994	1507
2,3,6-三甲基吡啶	1343	1425	1811	1232	1683
二甲基吡嗪	1383	1449	1854	1255	1705
2-甲基-3-乙基吡嗪	1354	1438	1825	1236	1685
2-甲氧基-3-异丁基吡嗪	1121	1550	1821	1358	1727

表 15-53 烷基-4-氧代喹唑啉保留指数[39]

柱温：220℃

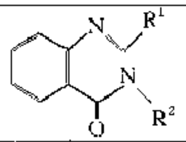
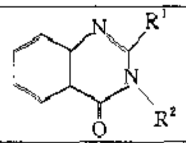
I 固定液 / 化合物			OV-1	OV-25	*I* 固定液 / 化合物			OV-1	OV-25
	R^1	R^2				R^1	R^2		
	H	H	1733	2360		C_4H_9	C_2H_5	1962	2430
	CH_3	H	1736	2337		C_5H_{11}	C_2H_5	2050	2515
	C_2H_5	H	1788	2365		H	CH_3	1639	2201
	C_3H_7	H	1853	2418		H	C_2H_5	1664	2199
	C_4H_9	H	1955	2509		H	C_3H_7	1740	2265
	C_5H_{11}	H	2050	2604		H	C_4H_9	1835	2349
	CH_3	CH_3	1733	2293		H	C_5H_{11}	1926	2442
	C_2H_5	CH_3	1800	2333		CH_3	C_3H_7	1826	2330
	C_3H_7	CH_3	1865	2380		CH_3	C_4H_9	1915	2416
	C_4H_9	CH_3	1957	2467		CH_3	C_5H_{11}	2003	2507
	C_5H_{11}	CH_3	2050	2551		C_2H_5	C_3H_7	1873	2350
	CH_3	C_2H_5	1749	2276		C_2H_5	C_4H_9	1961	2430
	C_2H_5	C_2H_5	1805	2302		C_2H_5	C_5H_{11}	2050	2520
	C_3H_7	C_2H_5	1869	2349					

表 15-54 *N*，*N'*-二苯基甲脒衍生物保留指数[30]

固定液：SE-30　　柱温：240℃

化合物		*I*	化合物		*I*
化合物的通式为 $XC_6H_4N{=}CHNC_6H_4Y$ 其取代基			化合物的通式为 $XC_6H_4N{=}CHNC_6H_4Y$ 其取代基		
X	Y		X	Y	
H	H	1933±1	*p*-OCH_3	*p*-Br	2543±1
H	*p*-CH_3	2122±2	*p*-OC_2H_5	*p*-OC_2H_5	2619±5
H	*p*-OCH_3	2266±3	*p*-OC_2H_5	*p*-Cl	2509±5
H	*p*-OC_2H_5	2319±5	*p*-Cl	*p*-Cl	2419±2
H	*p*-Cl	2215±2	*p*-Cl	*p*-Br	2535±1
H	*p*-Br	2321±4	*p*-Br	*p*-Br	2633±2
H	*m*-CH_3	2095±2	*m*-CH_3	*m*-CH_3	2180±2
H	*m*-OCH_3	2230±1	*m*-CH_3	*m*-OCH_3	2315±1
H	*m*-OC_2H_5	2291±3	*m*-CH_3	*m*-OC_2H_5	2384±4
H	*m*-Cl	2200±2	*m*-CH_3	*m*-Cl	2296±2
H	*m*-Br	2294±2	*m*-CH_3	*m*-Br	2401±8
p-CH_3	*p*-CH_3	2199±4	*m*-OCH_3	*m*-OCH_3	2477±3
p-CH_3	*p*-OCH_3	2326±1	*m*-OCH_3	*m*-OC_2H_5	2550±3
p-CH_3	*p*-OC_2H_5	2409±3	*m*-OCH_3	*m*-Cl	2458±0
p-CH_3	*p*-Cl	2304±1	*m*-OC_2H_5	*m*-OC_2H_5	2586±6
p-CH_3	*p*-Br	2406±1	*m*-OC_2H_5	*m*-Cl	2509±1
p-OCH_3	*p*-OCH_3	2485±3	*m*-Cl	*m*-Cl	2399±2
p-OCH_3	*p*-OC_2H_5	2539±3	*m*-Cl	*m*-Br	2518±1
p-OCH_3	*p*-Cl	2443±1	*m*-Br	*m*-Br	2604±6

参 考 文 献

1 Toth T. Magy Kem Foly,1969;75:245
2 Кудрявцев Р В,Широченкова В М. Ж А Х. 1969;24:1431
3 Hansen N H,Kiens K,Nielsen T. J Chrom Sci,1971;9:631
4 Heyns K,Roper H,Lebensm Z. Unters Forsch,1971;145:71
5 Toth T,Borsodi A. Magy Kem Foly,1971;77:578
6 Woerle R. Erdol Kohle Petrochem,1972;25:254
7 Цеханская С В,Семина Г Н,Черкаский А А. Зав Лаб,1972;38;1320
8 Golovnya R V,Zhuravleva L L. Chromatographia,1973;6:509
9 Tesarik K,Ghyczy S. J Chromatogr,1974;91:723
10 Riedo F,Fritz D,Tarjan G,et al. J Chromatogr,1976;126:63
11 Головня Р В,Журавлева И Л,Капустин Ю П. Ж А Х,1976;31:746
12 Журавлева И Л,Капустин Ю П,Головня Р В. Ж А Х,1976;31:1378
13 Pacakova V,Nemec I. J Chromatogr,1978;148:273
14 Головня Р В,Светлова Н И,Журавлева И Л. Ж А Х,1978;33,1618
15 Leclercq P A,Pacakova V. J Chromatogr,1979;179:193
16 Matisova E,Krupcik J,Liska O,et al. J Chromatogr,1979;169:261
17 Бонева С Т,Димов Н. Ж А Х,1979;34:1170
18 Papp O,Szasz G,Valko K. J Chromatogr,1980;194:365
19 Czerwiec Z,Budahegyi M V,Takacs J M. J Chromatogr,1981;214:47
20 Hu Jiehan,Ma Zhaolan,Zeng Xiaomou. Kexue Tongbao,1981;26:1089
21 Sellier F,Tersac G,Guiochon G. J Chromatogr,1981;219:213
22 Patte F,Etcheto M,Laffort L. Anal Chem,1982;54:2239
23 Головня Р В,Журавлева И Л,Светлова Н И,И Др. Ж А Х,1982;37:294
24 Szasz Gy,Papp O,Vamos J,et al. J Chromatogr,1983;269;91
25 Golovnya R V,Zhuravleva I L,Polanuer B M. J Chromatogr,1984;286:79
26 Korhonen I O O,Lind M A. J Chromatogr,1985;322:83
27 陈秀春,王玉霞,陈为通. 分析化学,1985;13:514
28 Korhonen I O O. J Chromatogr,1986;360:63
29 Morishita F,Morimoto S,Kojima T. HRC&CC,1986;9:688
30 Osek J,Jaroszewska-Manaj J,Krawczyk W,et al. J Chromatogr,1986;368:398
31 Papp O,Jozan M,Szasz Gy,et al. J Chromatogr,1987;403:11
32 Polanuer B M,Zhuravleva I L,Golovnya R V. J Chromatogr,1986;365:399
33 Берливов Ю С,Набивач В М,Дмитриков Б Л. Ж А Х,1987;42:1119
34 Головня Р В,Самусенко А Л,Дмитриев Л Б. Ж А Х,1987,42:699
35 Samusenko A L,Golovnya R V. Chromatographia,1988;25:531
36 Веревкин С П,Беленькая Р С,Рожнов А М,И Др. Ж А Х,1990;45:1786
37 Ayyangar N R,Tambe A S,Biswas S S. J Chromatogr,1991;543,179
38 Dutoit J C. J Chromatogr,1991;555:191
39 Papp O,Szasz Gy,Orfi L,et al. J Chromatogr,1991;537:371
40 蒋筱筠,曾宪谋,顾以健. 色谱,1991;9:187
41 Reddy K S,Dutoit J C,Kovats E. J Chromatogr,1992;609:229

（李浩春　修振佳）

第十六章　含硫化合物的保留指数

第一节　硫醇的保留指数

表 16-1　C_3~C_7 硫醇保留指数[7]

柱温：130℃

化合物 \ 固定液 I	Apiezon M	Triton X-305	PEG-1000	化合物 \ 固定液 I	Apiezon M	Triton X-305	PEG-1000
正丙硫醇	619	808	874	正壬硫醇	1233	1420	1483
正丁硫醇	724	924	978	异丙硫醇	566	735	793
正戊硫醇	827	1015	1079	仲丁硫醇	681	852	906
正己硫醇	929	1117	1181	叔丁硫醇	603	742	797
正庚硫醇	1031	1218	1282	叔戊硫醇	730	878	932
正辛硫醇	1132	1319	1383				

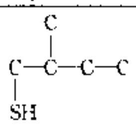
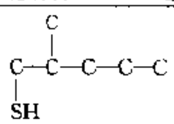
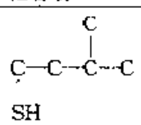
表 16-2　C_5~C_7 直链硫醇保留指数（一）[18]

固　定　液	PEG-20M	Ucon LB 550X	固　定　液	PEG-20M	Ucon LB 550X
化合物 \ 柱温/℃ I	93	95	化合物 \ 柱温/℃ I	93	95
1-戊硫醇	1052.9	911.9	2-庚硫醇	1165.5	1041.1
1-己硫醇	1153.2	1012.8	3-戊硫醇	979.5	853.9
1-庚硫醇	1253.8	1114.2	3-己硫醇	1062.5	943.9
2-戊硫醇	967.9	845.4	3-庚硫醇	1157.6	1037.1
2-己硫醇	1066.3	943.4	4-庚硫醇	1144.1	1026.4

表 16-3　C_5~C_7 直链硫醇保留指数（二）[13]

固　定　液	PEG-20M	DC-550	固　定　液	PEG-20M	DC-550
化合物 \ 柱温/℃ I	80	70	化合物 \ 柱温/℃ I	80	70
1-戊硫醇	1047.9	866.1	2-庚硫醇	1160.0	1004.4
1-己硫醇	1148.0	967.2	3-戊硫醇	973.9	815.5
1-庚硫醇	1248.7	1068.7	3-己硫醇	1058.0	906.0
2-戊硫醇	964.9	806.3	3-庚硫醇	1153.2	1002.5
2-己硫醇	1062.1	907.8	4-庚硫醇	1140.9	993.0

表 16-4　C_5、C_6 支链硫醇保留指数[13]

固　定　液	DC-550	固　定　液	DC-550	固　定　液	DC-550
化合物 \ 柱温/℃ I	70	化合物 \ 柱温/℃ I	70	化合物 \ 柱温/℃ I	70
	836.9		928.0		829.7

续表

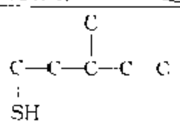
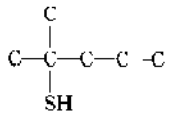
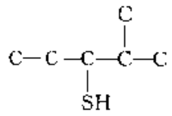
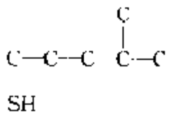
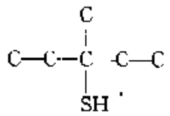
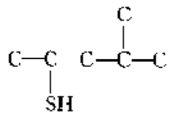
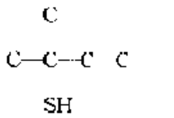
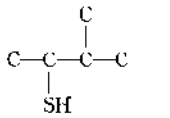
固 定 液	DC-550	固 定 液	DC-550	固 定 液	DC-550
I 柱温/℃ 化合物	70	I 柱温/℃ 化合物	70	I 柱温/℃ 化合物	70
	937.2		838.9		893.0
	930.4		873.1		859.6
	753.9		811.6		

表 16-5 烷基硫醇保留指数[8]

柱温：130℃

I 固定液 化合物	Apiezon M	OV-17	Triton X 305	PEG-1000	I 固定液 化合物	Apiezon M	OV-17	Triton X 305	PEG-1000
乙硫醇	517	599	696	753	2-戊硫醇	782	853	945	992
1-丙硫醇	623	703	801	857	2-己硫醇	883	956	1048	1095
1-丁硫醇	726	806	904	960	2-庚硫醇	983	1058	1149	1197
1-戊硫醇	828	908	1007	1063	2-辛硫醇	1082	1158	1249	1298
1-己硫醇	930	1010	1109	1165	2-甲基-1-丙硫醇	691	767	863	910
1-庚硫醇	1031	1111	1211	1267	2-甲基-2-丙硫醇	602	663	745	779
1-辛硫醇	1132	1212	1313	1369	3-甲基-1-丁硫醇	794	871	968	1017
1-壬硫醇	1233	1313	1415	1470	2-甲基-2-丁硫醇	728	796	879	918
1-癸硫醇	1334	1414	1517	1571	3-甲基-2-丁硫醇	773	842	929	978
1-正十一硫醇	1435	1515	1619	1672	2-丙烯基-1-硫醇	603	702	837	901
1-十二硫醇	1536	1616	1721	1773	2-丙炔基-1-硫醇	611	763	1025	1135
2-丙硫醇	566	637	727	773	环己硫醇	983	1082	1193	1261
2-丁硫醇	679	749	840	887	环庚硫醇	1.26	1232	1351	1427

表 16-6 硫醇和二硫醇保留指数[17]

柱温：130℃

I 固定液 化合物	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-20M	I 固定液 化合物	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-20M
乙硫醇	517	599	696	753	1-十二硫醇	1536	1616	1721	1773
1-丙硫醇	623	703	801	857	2-丙硫醇	566	637	727	773
1-丁硫醇	726	806	904	960	2-丁硫醇	679	749	840	887
1-戊硫醇	828	908	1007	1063	2-辛硫醇	1082	1158	1249	1298
1-己硫醇	930	1010	1109	1165	2-甲基-1-丙硫醇	691	767	863	910
1-庚硫醇	1031	1111	1211	1267	2-甲基-2-丙硫醇	602	663	745	779
1-辛硫醇	1132	1212	1313	1369	3-甲基-1-丁硫醇	794	871	968	1017
1-壬硫醇	1233	1313	1415	1470	3-甲基-2-丁硫醇	773	842	929	978
1-癸硫醇	1334	1414	1517	1571	1,1-二甲基-1-丙硫醇	728	796	879	918
1-十一硫醇	1435	1515	1619	1672					

续表

I 化合物 \ 固定液	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-20M	I 化合物 \ 固定液	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-20M
2-丙烯基-1-硫醇	603	702	837	901	1,4-丁二硫醇	1063	1234	1459	1574
2-丙炔基-1-硫醇	611	763	1025	1135	1,5-戊二硫醇	1167	1338	1558	1673
环己烷硫醇	983	1082	1193	1261	1,6-己二硫醇	1270	1439	1657	1770
环庚烷硫醇	1126	1232	1351	1427	1,2 丙二硫醇	895	1039	1247	1355
1,2-乙二硫醇	844	1006	1239	1348	1,3 丁二硫醇	995	1145	1351	1456
1,3-丙二硫醇	951	1119	1344	1457					

表 16-7 C_2～C_6 烷基二硫醇保留指数[8]

柱温：130℃

I 化合物 \ 固定液	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000	I 化合物 \ 固定液	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000
1,2 乙二硫醇	844	1006	1239	1348	1,4 丁二硫醇	995	1145	1351	1456
1,3 丙二硫醇	951	1119	1344	1457	1,5 戊二硫醇	1167	1338	1558	1673
1,2 丙二硫醇	895	1039	1247	1355	1,6-己二硫醇	1270	1439	1657	1770
1,3 丁二硫醇	1063	1234	1460	1574					

第二节 硫醚的保留指数

表 16-8 有机硫化合物保留指数 (一)[2]

固定液	DC-200		DC 550	SE-30		邻苯二甲酸二壬酯		邻苯二甲酸二壬酯十二苯胺
I 化合物 \ 柱温/℃	60	120	130	60	130	60	120	60
乙基硫醇	505	—	—	500		558	—	563
丙基硫醇	603		—	600	—	664	—	665
丁基硫醇	703	713	781	701	718	769	791	771
己基硫醇	904	917	975	904	918	971	986	976
庚基硫醇	—	1018	1076	-	1020		1085	
壬基硫醇	—	1218	1277		1219	—	1286	—
十二烷基硫醇	—		1579	--	1520		—	--
二甲基硫醚	516	·	—	515	—	577	—	583
二乙基硫醚	693	693	743	692	692	748	760	752
二丙基硫醚	879	888	938	878	888	932	940	934
二丁基硫醚	—	1081	1134	—	1081		1134	
二戊基硫醚	·	1277	1330	—	1276	—	1331	—
二己基硫醚		1472	1525	—	1473	—	1527	—
二甲基二硫醚	731	732	832	734	734	823	842	824
二乙基二硫醚	901	923	1002	904	921	982	1003	956
二丙基二硫醚	—	1104	1180	—	1104	—	1180	—
二丁基二硫醚	—	1288	1367	—	1289		1368	

表 16-9　有机硫化合物保留指数（二）[5]

固定液	Apiezon M		PEG-1000	PEG-20M	Triton X-305
化合物 ＼ 柱温/℃ ＼ *I*	60	130	60	130	130
乙基硫醇	515		739	—	
丙基硫醇	616	—	837	—	
丁基硫醇	716	726	935	970	920
己基硫醇	915	928	1130	1170	1117
庚基硫醇	—	1033	—	1273	1218
壬基硫醇	—	1235	—	1473	1421
十二碳硫醇	—		—	1773	—
异丙基硫醇	561	—	763	—	—
叔丁基硫醇	591	—	762	—	—
异戊基硫醇	751	764	949	973	926
叔戊基硫醇	712	723	891	931	875
烯丙基硫醇	586	—	886	—	—
二甲基硫醚	544		751	—	—
二乙基硫醚	718	689	901	902	870
二丙基硫醚	891	890	1065	1095	1054
二丁基硫醚	—	1086	—	1290	1242
二戊基硫醚	—	1281	—	1482	1436
二己基硫醚	—	1475	—	1673	1629
甲基乙基硫醚	619	—	829	—	—
甲基正丙基硫醚	711	—	919	—	—
二异丙基硫醚	796	789	939	967	927
二叔丁基硫醚	—	919	—	1073	1033
二异戊基硫醚	—	1201	—	1381	1337
二甲基二硫醚	747	788	1068	1101	1040
二乙基二硫醚	913	941	1195	1251	1182
二丙基二硫醚	—	1115	—	1412	1342
二丁基二硫醚	—	1300	—	1585	1520
二异丙基二硫醚	—	1023		1294	1233
二异丁基二硫醚	—	1207	—	1455	1399
二叔戊基二硫醚	—	1347	—	1590	1531
二叔丁基二硫醚	—	1125	—	1360	1307
四氢噻吩	807	834	1097	1168	1080
噻吩	672	702	1017	1054	961
苯硫酚	—	1002	—	1525	1411
3,5-二甲基-1,2,4-三噻戊烷	—	1158	—	1535	1449

表 16-10　硫醚保留指数（一）[1]

固定液	邻苯二甲酸二异癸酯			Apiezon L		
化合物 ＼ 柱温/℃ ＼ *I*	110	130	150	110	130	150
甲硫醚	579	585	592	516	523	528
甲基乙基硫醚	—	—	—	—	—	—
甲基丙基硫醚	783	787	792	718	723	727
甲基丁基硫醚	—	—	—	—	—	—
甲基仲丁基硫醚	843	849	853	784	790	796
乙硫醚	759	765	772	694	698	704
乙基丙基硫醚	—	—	—	—	—	—
乙基丁基硫醚	957	962	965	896	901	906
乙基仲丁基硫醚	—	—	—	—	—	—
丙硫醚	—	—	—	—	—	—
丙基丁基硫醚	1047	1052	1057	986	992	995
丙基仲丁基硫醚	996	999	1005	940	946	951
异丙基仲丁基硫醚	941	946	951	886	890	897
叔丁基硫醚	968	975	982	913	920	927
仲丁基硫醚	—	—	—	—	—	—
异丁基硫醚	1048	1052	1060	991	997	1003
丁硫醚	1146	1148	1155	1082	1086	1092
2-甲基硫杂环戊烷	—	—		—	—	—
2-乙基硫杂环戊烷	1026①	1031	1039	977①	981	994
2-丙基硫杂环戊烷	1120①	1125	1139	1071①	1077	1088
2-丁基硫杂环戊烷	1217①	1221	1228	1168①	1174	1182

①柱温为 120℃。

表 16-11　硫醚保留指数（二）[7]

柱温：130℃

化合物 \ 固定液 I	Apiezon M	Triton X-305	PEG-1000	化合物 \ 固定液 I	Apiezon M	Triton X-305	PEG-1000
二甲硫醚	522	724	792	乙丁硫醚	893	1065	1122
二乙硫醚	699	881	940	二丁硫醚	1082	1243	1297
甲丙硫醚	715	902	962	二戊硫醚	1277	1436	1487
甲丁硫醚	815	1004	1061	二异丙硫醚	787	929	978
二丙硫醚	888	1055	1110	二异戊硫醚	1196	1339	1386

表 16-12　硫醚保留指数（三）[12]

柱温：130℃

化合物 \ 固定液 I	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000	化合物 \ 固定液 I	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000
二异丙基硫醚	788	861	927	975	仲丁基异戊基硫醚	1091	1166	1228	1271
异丙基异丁基硫醚	895	965	1030	1074	仲丁基(1,2-二甲基)丙基硫醚	1054	1125	1179	1220
异丙基异戊基硫醚	997	1071	1139	1183	仲丁基叔丁基硫醚	934	998	1053	1092
异丙基仲丁基硫醚	887	959	1022	1069	仲丁基叔戊基硫醚	1050	1115	1173	1213
异丙基叔丁基硫醚	835	900	959	998	二异戊基硫醚	1197	1274	1341	1386
异丙基(1,2-二甲基)丙基硫醚	960	1030	1088	1131	异戊基叔丁基硫醚	1031	1102	1157	1199
异丙基叔戊基硫醚	952	1019	1079	1122	异戊基叔戊基硫醚	1144	1216	1273	1316
二异丁基硫醚	994	1064	1127	1171	二叔丁基硫醚	918	981	1040	1082
异丁基异戊基硫醚	1096	1169	1232	1276	叔丁基叔戊基硫醚	1045	1113	1170	1210
异丁基仲丁基硫醚	991	1061	1124	1166	二叔戊基硫醚	1121	1186	1240	1281
异丁基叔丁基硫醚	935	998	1051	1092	(1,2-二甲基)丙基硫醚	1123	1190	1240	1278
异丁基叔戊基硫醚	1047	1113	1169	1212	叔丁基(1,2-二甲基)丙基硫醚	1008	1071	1124	1162
二仲丁基硫醚	983	1055	1117	1158					

表 16-13　硫醚保留指数（四）[17]

柱温：130℃

化合物 \ 固定液 I	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000	化合物 \ 固定液 I	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000
甲基异丙基硫醚	675	762	847	909	戊基异丙基硫醚	1034	1115	1182	1232
乙基异丙基硫醚	746	833	905	959	己基异丙基硫醚	1132	1213	1280	1330
丙基异丙基硫醚	839	923	991	1046	甲基异丁基硫醚	775	859	937	1006
丁基异丙基硫醚	936	1018	1085	1137	乙基异丁基硫醚	850	931	1003	1056

续表

化合物 \ 固定液 I	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000
丙基异丁基硫醚	941	1020	1089	1140
丁基异丁基硫醚	1037	1115	1182	1232
戊基异丁基硫醚	1134	1212	1279	1328
甲基仲丁基硫醚	780	867	948	1010
乙基仲丁基硫醚	850	932	1004	1060
丙基仲丁基硫醚	941	1021	1088	1140
丁基仲丁基硫醚	1034	1114	1181	1230
戊基仲丁基硫醚	1131	1211	1275	1325
甲基叔丁基硫醚	724	803	880	938
乙基叔丁基硫醚	792	869	935	985
丙基叔丁基硫醚	882	957	1020	1068
丁基叔丁基硫醚	976	1050	1111	1158
戊基叔丁基硫醚	1073	1146	1204	1252
甲基异戊基硫醚	880	966	1051	1113
乙基异戊基硫醚	954	1038	1110	1168
丙基异戊基硫醚	1044	1127	1196	1250
丁基异戊基硫醚	1140	1223	1288	1341
戊基异戊基硫醚	1237	1319	1385	1437
甲基(1,2-二甲基)丙基硫醚	862	944	1025	1085
乙基(1,2-二甲基)丙基硫醚	928	1006	1080	1125
丙基(1,2-二甲基)丙基硫醚	1015	1092	1159	1204
丁基(1,2-二甲基)丙基硫醚	1108	1184	1246	1293
戊基(1,2-二甲基)丙基硫醚	1204	1281	1340	1387
甲基叔戊基硫醚	847	927	1004	1065
乙基叔戊基硫醚	913	989	1056	1112
丙基叔戊基硫醚	1000	1071	1137	1189
丁基叔戊基硫醚	1092	1167	1227	1277
戊基叔戊基硫醚	1189	1263	1322	1370
甲基(2-甲基)庚基硫醚	1150	1237	1313	1371
乙基(2-甲基)庚基硫醚	1216	1301	1368	1420
丙基(2-甲基)己基硫醚	1301	1385	1445	1495
二异丙基硫醚	788	861	927	975
异丙基异丁基硫醚	895	965	1030	1074
异丙基异戊基硫醚	997	1071	1139	1183
异丙基仲丁基硫醚	887	959	1022	1069
异丙基叔丁基硫醚	835	900	959	998
异丙基(1,2-二甲基)丙基硫醚	960	1030	1089	1131
异丙基叔戊基硫醚	952	1019	1079	1122
二异丁基硫醚	994	1064	1127	1171
异丁基异戊基硫醚	1096	1169	1232	1276
异丁基仲丁基硫醚	991	1061	1124	1166
异丁基叔丁基硫醚	935	998	1051	1092
异丁基叔戊基硫醚	1047	1113	1169	1212
二仲丁基硫醚	983	1055	1117	1158
仲丁基异戊基硫醚	1091	1166	1228	1271
仲丁基(1,2-二甲基)丙基硫醚	1054	1125	1179	1220
仲丁基叔丁基硫醚	934	998	1053	1092
仲丁基叔戊基硫醚	1050	1115	1173	1213
二异戊基硫醚	1197	1274	1341	1386
异戊基叔丁基硫醚	1031	1102	1157	1199
异戊基叔戊基硫醚	1144	1216	1273	1316
二叔丁基硫醚	918	981	1040	1082
叔丁基叔戊基硫醚	1045	1113	1170	1210

续表

化合物 \ I \ 固定液	Apiezon M	OV 17	Triton X-305	PEG-1000
二叔戊基硫醚	1121	1186	1240	1281
二(1,2-二甲基)丙基硫醚	1123	1190	1240	1278
叔丁基(1,2-二甲基)丙基硫醚	1008	1071	1124	1162
甲基乙烯基硫醚	608	716	835	912
乙基乙烯基硫醚	696	797	909	981
丙基乙烯基硫醚	794	890	1000	1069
丁基乙烯基硫醚	893	989	1097	1153
戊基乙烯基硫醚	972	1088	1196	1261
异丙基乙烯基硫醚	710	833	936	993
仲丁基乙烯基硫醚	845	936	1036	1098
甲基丙烯基硫醚	697	799	921	1001
乙基丙烯基硫醚	777	883	995	1067
丙基丙烯基硫醚	870	973	1081	1152
丁基丙烯基硫醚	967	1070	1174	1246
戊基丙烯基硫醚	1065	1169	1272	1343
异丙基丙烯基硫醚	822	921	1021	1089
仲丁基丙烯基硫醚	920	1019	1117	1184
(1,2-二甲基)丙基丙烯基硫醚	997	1090	1185	1248
叔丁基丙烯基硫醚	877	969	1066	1132
叔戊基丙烯基硫醚	994	1088	1186	1254
丙烯基硫醚	854	972	1114	1191
甲基丙炔基硫醚	705	859	1090	1204
乙基丙炔基硫醚	782	939	1155	1276
丙基丙炔基硫醚	877	1032	1241	1352
丁基丙炔基硫醚	974	1129	1337	1447
戊基丙炔基硫醚	1073	1228	1435	1511
异丙基丙炔基硫醚	833	978	1184	1291
仲丁基丙炔基硫醚	933	1083	1281	1386
异戊基丙炔基硫醚	1035	1184	1388	1492
叔丁基丙炔基硫醚	892	1036	1232	1338
叔戊基丙炔基硫醚	1010	1155	1354	1460
丙烯基丙炔基硫醚	858	1026	1264	1380
丙炔基硫醚	862	1076	1436	1595

表 16-14 硫醚保留指数（五）[16]

固定液	PEG 20M	DC 550
化合物 \ I \ 柱温/°C	80	70
甲基丁基硫醚	1029.3	860.8
甲基戊基硫醚	1128.1	963.0
甲基己基硫醚	1227.0	1064.5
甲基庚基硫醚	1326.8	1164.9
甲基辛基硫醚	1426.3	1265.0
甲基壬基硫醚	1525.7	1364.9
乙基丁基硫醚	1091.1	939.7
乙基戊基硫醚	1188.6	1040.2
乙基己基硫醚	1286.6	1139.2
乙基庚基硫醚	1385.3	1239.2
丙基丙基硫醚	1080.5	933.4
丙基丁基硫醚	1173.3	1031.2
丙基戊基硫醚	1269.7	1130.2
丙基己基硫醚	1367.0	1228.9
丙基庚基硫醚	1465.2	1328.6
丁基丁基硫醚	1265.6	1127.0
丁基戊基硫醚	1361.3	1225.6
丁基己基硫醚	1457.8	1324.5
戊基戊基硫醚	1456.3	1323.5

表 16-15　C_3～C_{14}烷基硫醚保留指数[17]

柱温：130℃

固定液 / I / 化合物	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000	固定液 / I / 化合物	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000
丙硫醚	523	611	710	774	3-十二烷基硫醚	1392	1481	1561	1610
2-丁基硫醚	616	705	800	859	3-十三烷基硫醚	1493	1561	1661	1710
2-戊基硫醚	715	802	897	951	4-庚基硫醚	888	974	1051	1101
2-己基硫醚	815	903	996	1051	4-辛基硫醚	985	1070	1146	1196
2-庚基硫醚	916	1005	1096	1151	4-壬基硫醚	1083	1169	1244	1294
2-辛基硫醚	1016	1106	1197	1251	4-癸基硫醚	1182	1269	1342	1393
2-壬基硫醚	1117	1207	1297	1352	4-十一烷基硫醚	1282	1368	1442	1492
2-癸基硫醚	1217	1308	1398	1453	4-十二烷基硫醚	1382	1468	1542	1592
2-十一烷基硫醚	1318	1408	1499	1554	4-十三烷基硫醚	1481	1568	1643	1692
2-十二烷基硫醚	1419	1509	1599	1656	5-壬基硫醚	1081	1167	1241	1289
2-十三烷基硫醚	1520	1609	1699	1757	5-癸基硫醚	1179	1266	1338	1387
2-十四烷基硫醚	1620	1710	1800	1858	5-十一烷基硫醚	1278	1365	1436	1485
3-戊基硫醚	698	788	875	927	5-十二烷基硫醚	1378	1464	1535	1584
3-己基硫醚	794	882	962	1017	5-十三烷基硫醚	1477	1563	1636	1684
3-庚基硫醚	893	979	1061	1113	6-十一烷基硫醚	1276	1363	1435	1483
3-辛基硫醚	992	1079	1159	1212	6-十二烷基硫醚	1375	1461	1532	1581
3-壬基硫醚	1092	1181	1259	1311	6-十三烷基硫醚	1475	1560	1631	1681
3-癸基硫醚	1193	1281	1360	1411	6-十四烷基硫醚	1574	1660	1731	1781
3-十一烷基硫醚	1293	1381	1460	1510	7-十三烷基硫醚	1473	1559	1630	1678

表 16-16　C_5～C_{10}直链硫醚保留指数[18]

固　定　液	PEG-20M	Ucon LB-550X	固　定　液	PEG-20M	Ucon LB-550X
柱温/℃ / I / 化合物	93	95	柱温/℃ / I / 化合物	93	95
甲基丁基硫醚	1032.6	899.7	丙基丁基硫醚	1178.2	1059.2
甲基戊基硫醚	1132.3	1000.2	丙基戊基硫醚	1274.2	1156.2
甲基己基硫醚	1232.1	1099.6	丙基己基硫醚	1372.0	1256.5
甲基庚基硫醚	1332.1	1199.3	丙基辛基硫醚	1470.3	1356.7
甲基辛基硫醚	1431.7	1299.5	二丁基硫醚	1270.6	1153.0
乙基丁基硫醚	1096.1	972.3	丁基戊基硫醚	1366.4	1251.2
乙基戊基硫醚	1193.0	1069.6	丁基己基硫醚	1463.8	1350.5
乙基己基硫醚	1291.2	1170.3	二戊基硫醚	1461.7	1348.2
乙基庚基硫醚	1390.7	1270.6	甲基壬基硫醚	—	1399.7

表 16-17　C_6、C_7支链硫醚保留指数[13]

固定液：DC-550　　柱温：70℃

化　合　物	I	化　合　物	I	化合物	I
C—S—C(C)—C—C—C	912.9	C—S—C(C)—C—C—C—C	1009.8	C—C—C—C—S—C(C)—C	980.6
C—C—S—C(C)—C—C	892.9	C—C—S—C(C)—C—C—C	981.0	C—S—C—C(C)—C—C	921.8
C—C—C—S—C(C)—C	883.4	C—C—C—S—C(C)—C—C	980.6	C—C—S—C—C(C)—C	893.6

续表

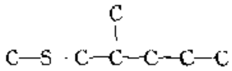
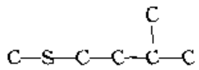
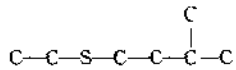
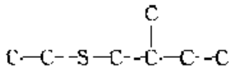
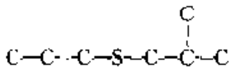
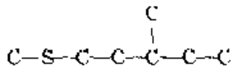
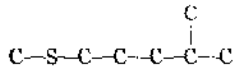
化　合　物	I	化　合　物	I	化合物	I
	1015.5		923.4		999.4
	996.7				
	982.6		1030.7		1023.7

表 16-18　烷基硫醚保留指数[16]

柱温：130℃

固定液 I / 化合物	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000	固定液 I / 化合物	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000
甲基异丙基硫醚	675	762	847	909	丙基异戊基硫醚	1044	1127	1196	1250
乙基异丙基硫醚	746	833	905	959	丁基异戊基硫醚	1140	1223	1288	1341
丙基异丙基硫醚	839	923	991	1046	戊基异戊基硫醚	1237	1319	1385	1437
丁基异丙基硫醚	936	1018	1085	1137	甲基(1,2-二甲基)丙基硫醚	862	944	1025	1085
戊基异丙基硫醚	1034	1115	1182	1232	乙基(1,2-二甲基)丙基硫醚	928	1006	1080	1125
己基异丙基硫醚	1132	1213	1280	1330	丙基(1,2-二甲基)丙基硫醚	1015	1092	1159	1204
甲基异丁基硫醚	775	859	937	1006	丁基(1,2-二甲基)丙基硫醚	1108	1184	1246	1293
乙基异丁基硫醚	850	931	1003	1056	戊基(1,2-二甲基)丙基硫醚	1204	1281	1340	1387
丙基异丁基硫醚	941	1020	1089	1140	甲基(1,1-二甲基)丙基硫醚	847	927	1004	1065
丁基异丁基硫醚	1037	1115	1182	1232	乙基(1,1-二甲基)丙基硫醚	913	989	1056	1112
戊基异丁基硫醚	1134	1212	1279	1328	丙基(1,1-二甲基)丙基硫醚	1000	1074	1137	1189
甲基仲丁基硫醚	780	867	948	1010	丁基(1,1-二甲基)丙基硫醚	1092	1167	1227	1277
乙基仲丁基硫醚	850	932	1004	1060	戊基(1,1-二甲基)丙基硫醚	1189	1263	1322	1370
丙基仲丁基硫醚	941	1021	1088	1140	甲基(2-甲基)丁基硫醚	1150	1237	1213	1371
丁基仲丁基硫醚	1034	1114	1181	1230	乙基(2-甲基)丁基硫醚	1216	1301	1368	1420
戊基仲丁基硫醚	1131	1211	1275	1325	丙基(2-甲基)丁基硫醚	1301	1385	1445	1495
甲基叔丁基硫醚	724	803	880	938	苯	675	762	894	965
乙基叔丁基硫醚	792	869	935	985	2-戊酮	644	787	924	1018
丙基叔丁基硫醚	882	957	1020	1068	1-丁醇	623	747	1048	1166
丁基叔丁基硫醚	976	1050	1111	1158					
戊基叔丁基硫醚	1073	1146	1204	1252					
甲基异戊基硫醚	880	966	1051	1113					
乙基异戊基硫醚	954	1038	1110	1168					

表 16-19 烯基、炔基和烷基硫醚的保留指数[16]

柱温：130℃

化合物 \ I \ 固定液	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000	化合物 \ I \ 固定液	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000
甲基乙烯基硫醚	608	716	835	912	叔丁基烯丙基硫醚	877	969	1066	1132
乙基乙烯基硫醚	696	797	909	981	叔戊基烯丙基硫醚	994	1088	1186	1254
正丙基乙烯基硫醚	794	890	1000	1069	烯丙基烯丙基硫醚	854	972	1114	1191
正丁基乙烯基硫醚	893	989	1097	1163	甲基炔丙基硫醚	705	859	1090	1204
正戊基乙烯基硫醚	992	1088	1196	1261	乙基炔丙基硫醚	782	939	1155	1270
异丙基乙烯基硫醚	740	833	936	993	正丙基炔丙基硫醚	877	1032	1241	1352
仲丁基乙烯基硫醚	845	936	1036	1098	正丁基炔丙基硫醚	974	1129	1337	1447
甲基烯丙基硫醚	697	799	921	1001	正戊基炔丙基硫醚	1073	1228	1435	1544
乙基烯丙基硫醚	777	883	995	1067	异丙基炔丙基硫醚	833	978	1184	1291
正丙基烯丙基硫醚	870	973	1081	1152	仲丁基炔丙基硫醚	933	1083	1281	1386
正丁基烯丙基硫醚	967	1070	1174	1246	异戊基炔丙基硫醚	1035	1184	1388	1492
正戊基烯丙基硫醚	1065	1169	1272	1343	叔丁基炔丙基硫醚	892	1036	1232	1338
异丙基烯丙基硫醚	822	921	1021	1089	叔戊基炔丙基硫醚	1010	1155	1354	1460
仲丁基烯丙基硫醚	920	1019	1117	1184	烯丙基炔丙基硫醚	858	1026	1264	1380
仲异戊基烯丙基硫醚	997	1090	1185	1248	二炔丙基硫醚	862	1076	1436	1595

表 16-20 硫醚与硫醇的保留指数[8]

固定液	Apiezon M		Carbowax 1000		固定液	Apiezon M		Carbowax 1000	
化合物 \ I \ 柱温/℃	70	100	70	100	化合物 \ I \ 柱温/℃	70	100	70	100
二乙基硫醚	715	710	906	920	丙基硫醇	617	621	841	865
二丙基硫醚	890	891	1071	1088	丁基硫醇	717	722	941	964
二甲基二硫醚	749	757	1074	1095	苯	668	678	947	963
二乙基二硫醚	915	924	1202	1229					

表 16-21 芳基硫醚与硫酚的保留指数[17]

柱温：130℃

化合物 \ I \ 固定液	Apiezon M	OV-17	Triton -303	PEG-1000	化合物 \ I \ 固定液	Apiezon M	OV-17	Triton -303	PEG-1000
苯硫酚	999	1142	1400	1531	苄基硫醇	1104	1271	1519	1657
甲基苯基硫醚	1106	1267	1489	1618	甲基苄基硫醚	1176	1350	1565	1694
乙基苯基硫醚	1160	1315	1513	1633	乙基苄基硫醚	1248	1421	1623	1748
正丙基苯基硫醚	1252	1403	1596	1709	异丙基苄基硫醚	1285	1451	1641	1757
正丁基苯基硫醚	1346	1498	1685	1797	2-甲基苯硫酚	1111	1252	1494	1622
异丙基苯基硫醚	1184	1326	1504	1610	甲基-(2-甲基苯基)硫醚	1209	1363	1576	1699
异丁基苯基硫醚	1303	1445	1629	1731	2,6-二甲基苯硫酚	1226	1361	1585	1708
仲丁基苯基硫醚	1282	1426	1600	1704	甲基-(2,6-二甲基苯基)硫醚	1256	1393	1572	1678
叔丁基苯基硫醚	1208	1343	1500	1594					
乙烯基苯基硫醚	1141	1287	1501	1620					

表 16-22　硫醚与噻吩的保留指数[11]

柱温：130℃

化合物	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000
2-甲基噻吩	797	900	1050	1138
3-甲基噻吩	807	910	1072	1160
2,5-二甲基噻吩	891	992	1123	1205
2-叔丁基噻吩	989	1086	1206	1284
3-叔丁基噻吩	1007	1107	1238	1320
2-噻吩甲醛	995	1228	1556	1729
2-乙酰基噻吩	1084	1312	1632	1807
2-噻吩基乙基硫代甲烷	1251	1440	1668	1802
甲基-3-噻吩基硫化物	1105	1279	1532	1672
2-溴噻吩	962	1088	1295	1403
3-溴噻吩	983	1120	1355	1472
2,3-二溴噻吩	1227	1388	1648	1779
3,4-二溴噻吩	1267	1442	1741	1889
糠基硫醇	903	1073	1336	1466
甲基糠基硫醚	984	1164	1390	1521
乙基糠基硫醚	1058	1238	1452	1577
甲基糠基二硫化物	1199	1406	1670	1818
2-乙基硫代呋喃	937	1093	1285	1395
5-叔丁基-2-乙基硫代呋喃	1157	1308	1418	1499
苯硫酚	999	1142	1410	1531
甲基苯基硫醚	1106	1267	1489	1618
乙基苯基硫醚	1160	1315	1513	1633
正丙基苯基硫醚	1252	1403	1596	1709
正丁基苯基硫醚	1346	1498	1685	1797
异丙基苯基硫醚	1184	1326	1504	1610
异丁基苯基硫醚	1303	1445	1629	1731
仲丁基苯基硫醚	1282	1426	1600	1704
叔丁基苯基硫醚	1208	1343	1500	1594
乙烯基苯基硫醚	1141	1287	1504	1620
苄基硫醇	1104	1271	1520	1657
甲基苄基硫醚	1176	1350	1565	1694
乙基苄基硫醚	1248	1421	1623	1748
异丙基苄基硫醚	1285	1451	1641	1757
2-甲基苯硫酚	1111	1252	1494	1622
甲基-(2-甲基苯基)硫醚	1209	1363	1576	1699
2,6-二甲基苯硫酚	1226	1361	1585	1708
甲基-(2,6-二甲基苯基)硫醚	1256	1393	1572	1678

表 16-23　二烷基二硫醚保留指数[12]

柱温：130℃

化合物	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000
C—S—S—C	765	888	1036	1119
C—S—S—C—C	853	974	1112	1190
C—S—S—C—C—C	946	1066	1198	1274
C—S—S—C—C—C—C	1044	1163	1290	1366
C—S—S—C—C—C—C—C	1142	1261	1387	1463
C—C—S—S—C—C	935	1054	1178	1257
C—C—S—S—C—C—C	1026	1144	1262	1339
C—C—S—S—C—C—C—C	1120	1240	1355	1427
C—C—S—S—C—C—C—C—C	1218	1338	1450	1523
C—C—C—S—S—C—C—C	1115	1231	1342	1418
C—C—C—S—S—C—C—C—C	1207	1326	1432	1504
C—C—C—S—S—C—C—C—C—C	1304	1422	1527	1598
C—C—C—C—S—S—C—C—C—C	1301	1418	1521	1592
C—C—C—C—S—S—C—C—C—C—C	1397	1514	1615	1685

表 16-24 烷基二硫醚保留指数[17]

柱温：130℃

化合物 \ 固定液 I	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000
C—C(C)—S—S—C	906	1024	1149	1221
C—C(C)—C—S—S—C	995	1111	1231	1302
C—C—C(C)—S—S—C	1005	1123	1244	1319
C—C(C)(C)—S—S—C	950	1054	1171	1238
C—C(C)—C—C—S—S—C	1102	1217	1338	1411
C—C(C)—C(C)—S—S—C	1085	1197	1315	1387
C—C(C)(C)—C—S—S—C	1072	1179	1294	1268
C—C(C)—C—S—S—C—C	1075	1187	1295	1363
C—C—C(C)—S—S—C—C	1081	1196	1304	1375
C—C(C)(C)—S—S—C—C	1023	1129	1230	1299
C—C(C)—C—C—S—S—C—C	1177	1290	1401	1469
C—C(C)—C(C)—S—S—C	1156	1266	1372	1440
C—C(C)(C)—C—S—S—C—C	1141	1250	1352	1420
C—C(C)—S—S—C—C—C	1071	1183	1288	1358
C—C(C)—C—S—S—C—C—C	1161	1270	1372	1439
C—C—C(C)—S—S—C—C—C	1166	1278	1380	1448
C—C(C)(C)—S—S—C—C—C	1112	1216	1308	1371
C—C(C)—C—C—S—S—C—C—C	1264	1376	1477	1543
C—C(C)—C(C)—S—S—C—C—C	1237	1347	1444	1512
C—C(C)(C)—C—S—S—C—C—C	1225	1330	1426	1495
C—C(C)—S—S—C—C—C—C	1165	1276	1378	1445
C—C(C)—C—S—S—C—C—C—C	1254	1364	1459	1526
C—C(C)(C)—S—S—C—C—C—C	1202	1303	1396	1458

表 16-25 烃基二硫醚保留指数[17]

柱温：130℃

化合物 \ 固定液 I	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG 1000
C=C C S S C	928	1064	1229	1322
C-C C S—S—C—C	1008	1144	1297	1384
C=C—C—S—S-C —C—C	1098	1230	1375	1460
C C C C S—S—C—C	1023	1133	1232	1298
C C C—C—S—S C C C	1118	1223	1317	1380
C C C—C—S S C C—C	1119	1228	1322	1388
C C C—C—S—S—C—C C	1060	1170	1246	1308
C C—C—S—S—C— C C—C—C	1218	1325	1422	1486
C C C C—C—S—S—C—C—C	1191	1296	1387	1451
C=C—C—S—S— C C C	1053	1183	1321	1406
C C—C—C—S—S—C— C —C—C	1208	1308	1400	1461
C C C—C—S—S—C—C—C	1159	1258	1329	1391
C C=C—C—S S C —C—C—C	1149	1270	1408	1488
C C C C S S— C —C—C—C	1212	1320	1411	1475
C C C—C S S C—C—C C	1153	1254	1338	1399
C=C C S S— C C C—C	1152	1280	1416	1498
C C C—C—S—S—C—C C C	1122	1220	1305	1364
C C—C—S—S—C—C C C —C—C—C	1257	1355	1440	1498
C C—C C S—S—C—C C	1098	1225	1344	1430
C C—C—C—C—S—S— C —C—C—C—C	1409	1517	1507	1669
C=C—C—S S C C —C C C	1246	1372	1509	1588
C C C—C C S—S— C C —C—C—C	1348	1450	1530	1595
C C—C—C—S S C C —C—C—C C	1348	1448	1536	1598
C=C—C—S—S—C— —C=C	1080	1230	1412	1508

表 16-26　三、四硫醚保留指数[17]

柱温：130℃

化合物 \ 固定液 I	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000
C—S—S—S—C	1004	1155	1329	1427
C—S—S—S—C—C	1082	1233	1389	1486
C—C(C)—S—S—S—C	1126	1271	1412	1500
C—C—S—S—S—C—C	1157	1308	1448	1542
C—C(C)—S—S—S—C—C	1199	1342	1468	1553
C—C(C)—S—S—S—C(C)—C	1237	1378	483	1559
C—S—S—C—S—C	1143	1329	1556	1684
C—S—S—S—S—C	1247	1431	1631	1753
C—S—S—S—S—C—C	1321	1503	691	1806
C—C—S—S—S—S—C—C	1394	1576	1750	1858

第三节　多种硫化合物的保留指数

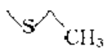
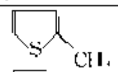
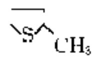
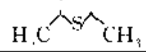
表 16-27　硫化物保留指数[4]

柱温：130℃

化合物 \ 固定液 I	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000
2-硫代丙烷	523	611	710	774
2-硫代丁烷	616	705	800	859
2-硫代戊烷	715	802	897	951
2-硫代己烷	815	903	996	1051
2-硫代庚烷	916	1005	1096	1151
2-硫代辛烷	1016	1106	1197	1251
2-硫代壬烷	1117	1207	1297	1352
2-硫代癸烷	1217	1308	1398	1453
2-硫代十一烷	1318	1408	1499	1554
2-硫代十二烷	1419	1509	1599	1656
2-硫代十三烷	1520	1609	1699	1757
2-硫代十四烷	1620	1710	1800	1858
3-硫代戊烷	698	788	875	927
3-硫代己烷	794	882	962	1017
3-硫代庚烷	893	979	1061	1113
3-硫代辛烷	992	1079	1159	1257
3-硫代壬烷	1092	1180	1259	1311
3-硫代癸烷	1193	1281	1360	1411
3-硫代十一烷	1293	1381	1460	1510
3-硫代十二烷	1393	1481	1561	1610
3-硫代十三烷	1493	1581	1661	1710
4-硫代庚烷	888	974	1051	1107
4-硫代辛烷	985	1070	1146	1196
4-硫代壬烷	1083	1169	1244	1294
4-硫代癸烷	1182	1269	1342	1393
4-硫代十一烷	1282	1368	1442	1492
4-硫代十二烷	1382	1468	1542	1592
4-硫代十三烷	1481	1568	1643	1692
5-硫代壬烷	1081	1167	1241	1289
5-硫代癸烷	1179	1266	1338	1387
5-硫代十一烷	1278	1365	1436	1485
5-硫代十二烷	1378	1464	1535	1581
5-硫代十三烷	1477	1563	1636	1684
6-硫代十一烷	1276	1363	1435	1483
6-硫代十二烷	1375	1461	1532	1581
6-硫代十三烷	1475	1560	1631	1681
6-硫代十四烷	1574	1660	1731	1781
7-硫代十三烷	1173	1559	1630	1673

表 16-28　硫杂环化合物保留指数（一）[2]

柱温：130℃

化合物 \ 固定液 I	Apiezon M	Triton X-305	PEG-1000
	601	871	952
	656	906	976
	742	996	1071
	696	982	1068
	799	1058	1139
	831	1093	1175
	869	1101	1179
	901	1107	1174

续表

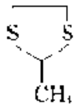
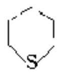
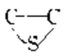
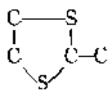
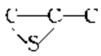
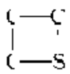
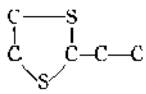
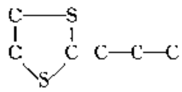
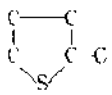
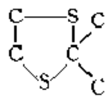
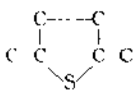
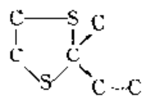
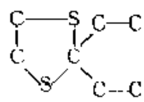
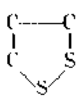
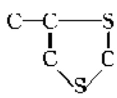
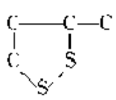
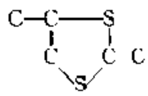
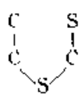
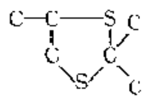
I \ 固定液 化合物	Apiezon M	Triton X-305	PEG-1000	I \ 固定液 化合物	Apiezon M	Triton X-305	PEG-1000
	1007	1426	1535		1089	1505	1627
	1022	1394	1505		1122	1582	1714
	915	1159	1240		1313	1986	—

表 16-29 硫杂环化合物保留指数（二）[17]

柱温：130℃

I \ 固定液 化合物	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000	I \ 固定液 化合物	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000
	606	712	863	946		1027	1196	1385	1500
	659	762	895	970					
	744	865	986	1065		1128	1291	1472	1582
	834	960	1088	1172		1222	1385	1562	1671
	870	991	1104	1176		1032	1187	1352	1452
	901	1005	1102	1171		1136	1299	1460	1558
	918	1036	1155	1236		1253	1400	1557	1654
	1023	1203	1417	1541		1052	1219	1415	1530
	1067	1232	1428	1543		1060	1211	1375	1476
	1013	1198	1417	1543		1063	1196	1337	1424

续表

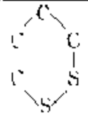
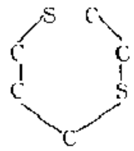
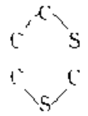
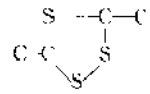
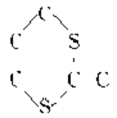
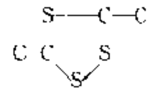
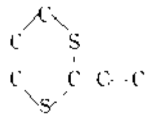
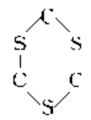
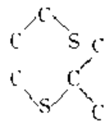
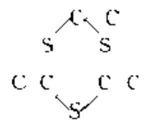
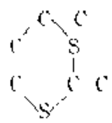
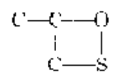
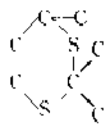
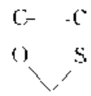
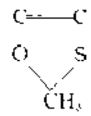
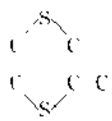
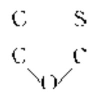
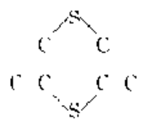
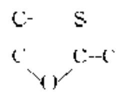
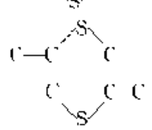
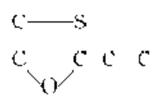
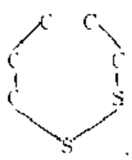
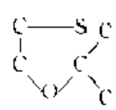
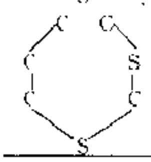
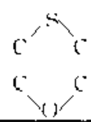
I 固定液 / 化合物	Apiezon M	OV 17	Triton X 305	PEG-1000	I 固定液 / 化合物	Apiezon M	OV 17	Triton X 305	PEG 1000
	1086	1216	1430	1539		1219	1407	16.6	1749
	1131	1331	1572	1715	反式 	1175	1332	1520	1631
	1145	1330	1532	1659	顺式 	1181	1339	1534	1617
	1243	1426	1621	1744		1323	1594	1975	2178
	1147	1342	1522	1639		1356	1542	1801	1949
	1179	1340	1530	1617		885	1087	1316	1143
	1200	1358	1520	1627		1168	1404	1800	1985
	1094	1280	1494	1623		1213	1455	1789	1961
	1138	1308	1500	1619		806	975	1177	1287
	1174	1313	1493	1600		830	981	1150	1250
	1192	1349	1529	1641		930	1078	1237	1351
	1210	1361	1533	1644		853	990	1141	1227
	1246	1483	1637	1796		897	1063	1256	1372

表 16-30 噁唑保留指数[21]

柱温：110℃

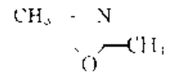
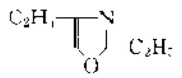
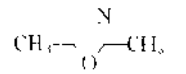
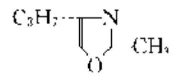
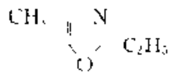
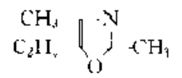
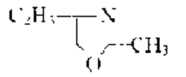
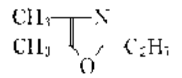
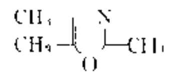
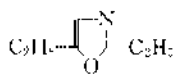
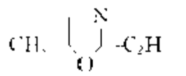
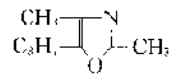
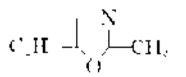
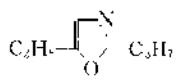
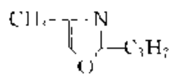
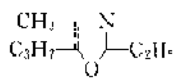
化合物 \ 固定液	OV-101 +KF	Triton X-305 +KF	PEG-40M +KF	化合物 \ 固定液	OV-101 +KF	Triton X-305 +KF	PEG-40M +KF
	730	1043	1094		903	1172	1228
	765	1092	1145		910	1198	1217
	818	1104	1159		923	1201	1252
	820	1111	1171		926	1210	1260
	843	1150	1200		940	1222	1279
	851	1155	1204		1000	1269	1319
	855	1162	1222		1024	1294	1347
	901	1175	1229		1079	1327	1374

表 16-31 噻吩保留指数[22]

柱温：100℃

化合物 \ 固定液	SE-30	OV-101	OV-17	Carbowax-40M	化合物 \ 固定液	SE-30	OV-101	OV-17	Carbowax 40M
噻吩	668	668	785	1039	3-甲酰噻吩	956	960	1192	1653
2-甲基噻吩	770	770	886	1112	2-甲基-5-甲酰噻吩	1085	1087	1320	1735
3-甲基噻吩	775	775	857	1136	3-甲基-2-甲酰噻吩	1086	1090	1326	1761
2,5-二甲基噻吩	865	863	975	1178	2-乙酰噻吩	1058	1060	1289	1731
2-甲酰噻吩	971	973	1201	1663	3-乙酰噻吩	1050	1052	1281	1728

表 16-32 噻吩及其衍生物保留指数[17]

柱温：130℃

化合物 \ 固定液	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000	化合物 \ 固定液	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000
噻吩	694	800	971	1061	2-乙酰噻吩	1084	1312	1632	1807
2-甲基噻吩	797	900	1050	1138	2-噻吩基乙基甲基硫醚	1251	1440	1668	1802
3-甲基噻吩	807	910	1072	1160	甲基-3-噻吩基硫醚	1105	1279	1532	1672
2,5-二甲基噻吩	891	992	1123	1205	2-溴噻吩	962	1088	1295	1403
2-叔丁基噻吩	989	1086	1206	1284	3-溴噻吩	983	1120	1355	1472
3-叔丁基噻吩	1007	1104	1238	1320	2,3-二溴噻吩	1227	1388	1648	1779
2-噻吩甲醛	995	1228	1556	1729	3,4-二溴噻吩	1267	1442	1741	1889

表 16-33　噻唑保留指数[21]

柱温：110℃

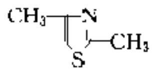
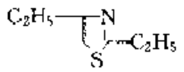
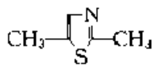
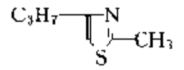
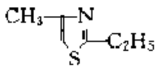
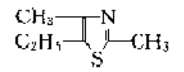
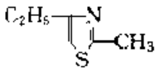
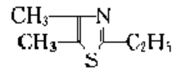
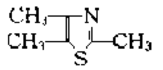
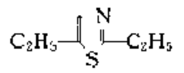
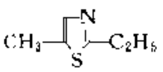
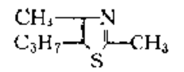
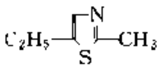
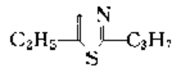
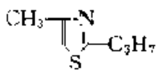
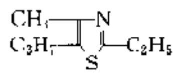
I / 化合物 \ 固定液	OV-101 +KF	Triton X-305 +KF	PEG-40M +KF	I / 化合物 \ 固定液	OV-101 +KF	Triton X-305 +KF	PEG 40M +KF
	887	1225	1291		1053	1343	1409
	922	1267	1324		1064	1380	1428
	970	1285	1349		1072	1380	1438
	974	1291	1356		1077	1381	1439
	997	1319	1380		1090	1402	1463
	1004	1325	1388		1157	1457	1515
	1010	1337	1403		1175	1475	1534
	1053	1357	1418		1233	1512	1567

表 16-34　烷基噻唑保留指数[20]

柱温：100℃

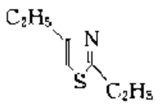
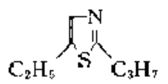
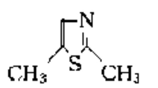
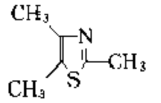
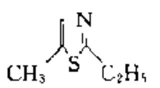
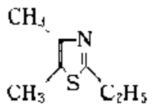
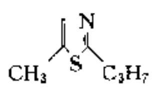
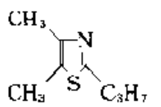
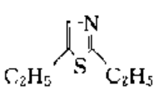
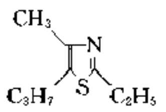
I / 化合物 \ 固定液	Apiezon L +KF	Triton X-305 $+Na_3PO_4$	Carbowax 1000 $+Na_3PO_4$	I / 化合物 \ 固定液	Apiezon L +KF	Triton X-305 $+Na_3PO_4$	Carbowax 1000 $+Na_3PO_4$
	1044	1332	1429		1165	1464	1566
	908	1245	1360		995	1307	1418
	997	1313	142[illegible]		1073	1370	1474
	1083	1389	1493		1153	1442	1546
	1083	1392	1495		1224	1503	1600

表 16-35　硫、氮杂三环化合物保留指数（一）[16]

柱温：250℃

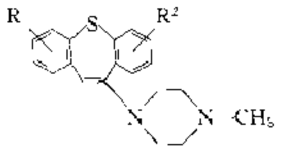
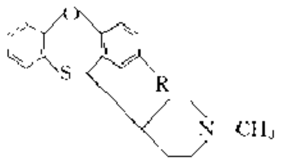
化合物 结构式	取代基	Dexsil 300	Dexsil 400	Dexsil 410
	7-F,8-Cl	2884	2953	2803
	2-Cl,8-F	2910	2989	2843
	7,8-Cl_2	3095	3169	3007
	7,8-F_2	2756	2821	2646
	7-CF_3,8-Cl	2827	2890	2756
	8-CF_3	2546	2602	2548
	8-OCH_3	2912	2991	2840
	8-Cl	2845	2922	2765
	8-Cl,10-CH_3	2897	2968	2848
	3-F,8-OCH_3^b	2882	—	—
	3-F,8-Cl[b]	2806	-	—

表 16-36　硫、氮杂三环化合物保留指数（二）[16]

柱温：250℃

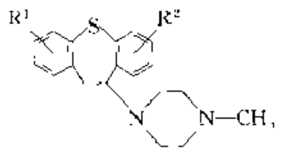
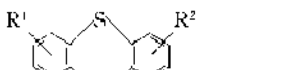
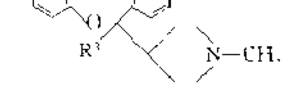
化合物 结构式	取代基	Dexsil 300	Dexsil 400	Dexsil 410
	H	2687	2766	2675
	8-Cl	2860	2949	2846
	8-F	2666	2753	2621
	8-Br	2936	2996	2915
	8-CF_3	2578	2641	2569
	8-SCH_3	3073	3195	3112
	8-OCH_3	2902	2991	2871
	8-OC_2H_5	3006	3108	2978
	8-CH_3	2750	2824	2739
	8-NO_2	3191	3289	3180
	7-Cl,8-F	2867	2941	2794
	3-F,8-Cl	2853	2932	2771
	3,8-Cl_2	3005	3139	2991
	7,8-Cl_2	3075	3141	2980
	7-F,8-CH_3	2737	—	2674
	2-F,8-SCH_3	2991	3132	2965
	3,8-F_2	2646	2702	2616
	3-F,8-SCH_3	3012	3154	2985
	6,8-F_2	2613	2668	2590
	7-CF_3,8-Cl	2812	2858	2834
	8-Cl	2821	2897	2741
	8-CF_3	2551	2579	2533

表 16-37 硫代酸酯保留指数[1]

柱温：130℃

化合物 \ 固定液	Apiezon M	OV-17	Triton X-303	PEG-1000	化合物 \ 固定液	Apiezon M	OV-17	Triton X-303	PEG 1000
硫代乙酸甲酯	683	834	998	1090	硫代丙酸正丙酯	943	1085	1206	1281
硫代乙酸乙酯	754	899	1016	1131	硫代丙酸正丁酯	1043	1182	1302	1375
硫代乙酸正丙酯	851	994	1135	1217	硫代丙酸异丙酯	889	1018	1132	1201
硫代乙酸正丁酯	950	1093	1233	1314	硫代丙酸异丁酯	1002	1139	1249	1322
硫代乙酸正戊酯	1048	1192	1330	1412	硫代丙酸仲丁酯	987	1124	1229	1299
硫代乙酸异丙酯	796	931	1064	1139	硫代丁酸甲酯	871	1016	1157	1237
硫代乙酸异丁酯	908	1046	1179	1258	硫代丁酸乙酯	939	1078	1195	1271
硫代乙酸仲丁酯	895	1032	1163	1239	硫代丁酸正丙酯	1032	1171	1282	1357
硫代乙酸叔丁酯	834	957	1077	1146	硫代丁酸正丁酯	1129	1267	1377	1452
硫代乙酸烯丙基酯	835	993	1170	1269	硫代丁酸异丙酯	976	1102	1206	1276
硫代丙酸甲酯	785	929	1081	1161	硫代丁酸异丁酯	1088	1223	1324	1394
硫代丙酸乙酯	849	992	1119	1198	硫代丁酸仲丁酯	1072	1207	1304	1370

表 16-38 硫代缩水甘油酸甲酯保留指数[6]

固定液	Apiezon M		Triton X-350		PEG 1000		DEGA	
化合物 \ 柱温 ℃	60	130	60	130	60	130	60	130
环硫乙烷	588		843	—	900	—	995	-
2-甲基环硫乙烷	612	—	871	-	925	-	1013	--
α,β-硫代缩水甘油酸甲酯	—	935	—	1411	—	1532	—	1769
α-甲基硫代缩水甘油酸甲酯	—	948		1361	—	1467	--	1684
β-甲基硫代缩水甘油酸甲酯	-	979	—	1116		1527	-	1762
β,β′-二甲基硫代缩水甘油酸甲酯	—	1012		1422	—	1525	-	1718

表 16-39 硫代烃保留指数[1]

固定液：OV-1 柱温：130℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
1,2-二硫代丙烷	873	二硫代环戊烷	1114	1,6-二硫代己烷	1258
硫赶苯酚	954	1,5-二硫代戊烷	1147	硫代正癸烷	1324
α-硫代甲苯	1050	硫代正壬烷	1218		

表 16-40 呋喃衍生物保留指数[17]

柱温：130℃

化合物 \ 固定液	Apiezon M	OV-17	Triton X-303	PEG 1000	化合物 \ 固定液	Apiezon M	OV-17	Triton X-303	PEG 1000
糠基硫醇	903	1073	1336	1466	甲基糠基二硫化物	1199	1406	1670	1818
甲基糠基硫醚	984	1161	1390	1521	2-乙基呋喃	937	1093	1285	1395
乙基糠基硫醚	1058	1238	1452	1577	5-叔丁基-2-乙基呋喃	1157	1308	1418	1499

表 16-41 含硫化合物保留指数（一）[14]

柱温：120℃

固定液 / I / 化合物	Zonyl E 7	PEG-1540	二氰基乙氧基丙烷	聚苯醚六环	DEGS
1-硫代乙烷	625	753	970	635	884
1,2-二硫代乙烷	1044	1361	1771	1099	1585
1-硫代丙烷	730	865	1070	745	979
2-硫代丙烷	693	788	975	677	882
烯丙硫醇	740	909	1165	757	1053
1-硫代丁烷	849	965	1193	856	1084
硫代异丁烷	817	920	1123	812	1020
硫代叔丁烷	717	788	957	693	878
四氢化噻吩	1038	1179	1509	1035	1363
噻吩	881	1056	1353	871	1236
1-硫代戊烷	951	1073	1293	956	1193
硫代异戊烷	817	869	1018	805	983
二噻戊烷	1132	1367	1739	1144	1574
2-甲基噻吩	996	1154	1441	970	1314
硫代己烷	1062	1189	1407	1070	1297
2,5-二甲基噻吩	1094	1224	1508	1052	1377
硫代苯	1374	1632	2103	1365	1918
1-硫代庚烷	1164	1282	1508	1166	1407
苯硫醇	1379	1658	2112	1372	1920
1-硫代辛烷	1269	1386	1615	1271	1514
1-硫代壬烷	1374	1490	1722	1377	1621
1-硫代癸烷	1479	1594	1829	1482	1728
二甲基硫	694	776	1015	654	912
二乙基硫	864	930	1171	831	1057
二丙基硫	1049	1112	1339	1021	1228
二丙烯基硫	821	965	1238	818	1110
二烯丙基硫	1063	1188	1483	1034	1355
二异戊基硫	1374	1387	1593	1303	1169
二甲基二硫	935	1138	1425	947	1286
二乙基二硫	1113	1292	1563	1112	1425
二丁基硫	1255	1322	1525	1217	1100
甲基乙基硫	626	664	799	611	805
甲基丙基硫	885	961	1196	853	1076
三硫甲烷	1165	1456	1779	1230	1616
硫代氰酸甲酯	1160	1325	1821	985	1583
乙酸硫代甲酯	1029	1095	1433	899	1286
异硫代氰酸乙酯	1077	1265	1651	1019	1461
丙酸硫代甲酯	1109	1179	1507	995	1357
异硫代氰酸烯丙酯	1144	1383	1765	1101	1591
丁酸硫代甲酯	1188	1255	1580	1079	1428
异戊酸硫代甲酯	1239	1284	1585	1117	1444
异硫代氰酸苯酯	1486	1731	2104	1437	1985

表 16-42 含硫化合物保留指数（二）[4]

固定液 / 柱温/℃ / I / 化合物	邻苯二甲酸二丁酯	PEG-400		角鲨烷		Apiezon L
	86	86	120	86	120	120
正丁基硫醇	625.8	771.8	944.7	693.0	701.0	673.3
正己基硫醇	775.7	1019.1	1096.6	752.0	756.8	749.2
二乙硫醚	750.3	952.6	959.6	691.6	694.9	696.5
二丙硫醚	937.1	1134.8	1144.4	877.5	882.4	890.1
二丁硫醚	1124.0	1316.9	1328.8	1064.4	1069.8	1083.8
噻吩	758.7	1065.5	1088.2	632.2	643.6	692.9
2-甲基噻吩	850.5	1140.2	1159.9	746.3	747.8	798.2
2,5-二甲基噻吩	938.3	1262.3	1267.9	840.0	845.1	894.0
硫代环戊烷	874.4	659.0	--	771.8	775.0	839
2-丙基硫代环戊烷	1081.0	1167.6	1208.4	1013.3	1017.0	1072.5
丁基硫代环戊烷	1151.2	1454.7	1486.8	1092.7	1098.0	1168.0
环己硫醇	827.5	758.0	814.5	665.9	686.7	685.4
苯硫醇	922.4	1076.8	1103.4	933.4	942.1	965.8
对甲苯硫酚	1008.0	1454.7	1483.6	959.9	1116.4	1048.0

表 16-43 含硫化合物保留指数（三）[17]

柱温：130℃

固定液 / I / 化合物	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG-1000	固定液 / I / 化合物	Apiezon M	OV-17	Triton X-305	PEG 1000
二硫化碳	612	663	734	748	1,1,3-三(甲基硫代)丙烷	413	1631	1862	2002
二甲基亚砜	850	1095	1479	1681	甲基乙醚氢硫基乙酸	791	987	1265	1401
1-甲基-4-硫基-2-戊酮	924	1097	1317	1135	甲基乙醚 α-氢硫基丙酸	813	1000	1227	1346
2-甲基硫代丙醛	885	1099	1361	1506	硫代甲基乙醚-α-(甲硫基)丙酸	1036	1227	1458	1581
二(2-巯基乙基)硫醚	1137	1303	—	—					

表 16-44 含硫化合物保留指数（四）[10]

固定液：Apiezon M　　柱温：130℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
2-硫代丙烷	523	2-硫代庚烷	916	3,3,5-三甲基-2,4-二硫代己烷	1089
1-硫代丙烷	623	3,4-二硫代己烷	935	1,4-二噻烷	1095
3-硫代戊烷	698	2,4-二硫代己烷	979	苯基硫代甲烷	1106
2,3-二硫代丁烷	765	3,3-二甲基-2,4-二硫代戊烷	986	2,6-二甲基-1,4-二噻烷	1179
2-硫代己烷	815	2-噻吩醛	995	2,4,4,6-四甲基-3,5-二硫代庚烷	1191
1,2-二硫代乙烷	814	1,3-二硫戊环	1015	2,5-二甲基-1,4-二噻烷	1191
糠基硫醇	903	3,5-二硫杂庚烷	1054	2-丙基-1,3-二硫戊环	1222
2,4-二硫代戊烷	903	2-乙酰噻吩	1084		

参 考 文 献

1 Martinu V, Janak J. J Chromatogr 1970;52;69

2 Голомия Р В, Арсеньев Ю Н. Изв АН СССР Сер Хим, 1970;1399

3 Скоре лена В Д, Шевченко Н А. Ж А Х, 1971;26;1227

4 Agrawal B B, Tesarik K, Janak J. J Chromatogr 1972;65;207

5 Голомия Р В, Арсеньев Ю Н. Изв АН СССР Сер Хим, 1972;1402

6 Голомия Р В, Гарбузов В Г. Изв АН СССР Сер Хим, 1973;2139

7 Golovnya R V, Garbuzov V G. Chromatographia, 1975;8:265
8 Головня Р В, Гарбузов В Г, Мишарина Т А. Изв АН СССР Сер Хим, 1976;103
9 Головня Р В, Гарбузов В Г, Мишарина Т А. Изв АН СССР Сер Хим, 1976;2266
10 Головня Р В, Гарбузов В Г, Мишарина Т А. Изв АН СССР Сер Хим, 1978;387
11 Головня Р В, Гарбузов В Г, Аэров А Ф. Изв АН СССР Сер Хим, 1978;2543
12 Головня Р В, Мишарина Т А, Гарбузов В Г, Изв АН СССР Сер Хим, 1979;1029
13 Morishita F, Murakita H, Takemura Y, et al. J Chromatogr, 1982;239:483
14 Patte F, Etcheto M, Laffort L. Anal Chem, 1982;54:2239
15 Zygmunt B, Warencki W, Staszewski R. J Chromatogr, 1983;265:136
16 Tomkova H. Kuchar M, Rejholec V, et al. J Chromatogr, 1985;329:113
17 Гарбузов В Г, Мишарина Т А, Аэров А Ф, идр. Ж А Х, 1985;40:709
18 森下富士夫, 村北宏之, 小島次雄. 分析化学, 1985;34:800
19 Grigoryeva D N, Golovnya R V, Misharina T A, et al. J Chromatogr, 1986;364:63
20 Golovnya R V, Zhuravleva I L, Yakush E V. Chromatographia, 1987;23:595
21 Головня Р В, Шендерюк В В, Журавлева И Л, идр. Ж А Х, 1991;46:313
22 Golovnya R V, Misharina T A, Beletskiy I V. Chromatographia, 1992;34:497

（李浩春　修振佳）

第十七章　含卤素化合物的保留指数

第一节　卤代烃的保留指数

表 17-1　C_2～C_5 全氟代烃保留指数[19]

固定液	去活硅胶	丙烯酸十二氟庚酯	固定液	去活硅胶	丙烯酸十二氟庚酯
I ＼ 柱温/℃ 化合物	185	0	I ＼ 柱温/℃ 化合物	185	0
八氟乙烷	181.7	160.0	环八氟丁烯	364.9	415.6
四氟乙烯	210.2	254.9	反八氟-2-丁烯	391.4	440.5
八氟丙烷	274.2	269.2	顺八氟-2-丁烯	391.4	450.3
正六氟丙烯	324.7	369.2	正十二氟戊烷	440.0	467.8
正十氟丁烷	359.3	363.6			

表 17-2　氟代烃保留指数[26]

柱温：50℃

I ＼ 固定液 化合物	全氟烷烃	聚氟三氯乙烯	QF-1	角鲨烷	PEG-1000	DEGS	OV-275
全氟正庚烷	528	623	500	300	225	315	301
全氟正辛烷	615	716	565	341	252	425	404
全氟正癸烷	804	902	691	425	380	645	587
全氟正十一烷	902	994	771	473	473	768	668
全氟正十二烷	904	1058	857	528	558	877	772
全氟正十四烷	-		1014	644	726	1095	942
全氟-1-庚烯	553	675	564	312	260	393	382
全氟-1-辛烯	651	749	646	365	317	530	460
全氟-1-壬烯	737	830	730	423	367	654	530
全氟-3,4-二甲基-3-己烯	608	--	587	322	238	409	104
全氟-乙基-3,4-二甲基-2-己烯	745	832	725	409	318	606	561
全氟环己烷	390	516	412	278	245	192	307
全氟环己烯	428	568	534	316	263	231	349
全氟甲基环己烷	643	611	524	303	254	269	299
全氟苯	585	785	837	576	731	810	865
1*H*-全氟正己烷	580	616	586	300	375	501	349
1*H*-全氟正庚烷	635	711	660	344	423	593	446
1*H*-全氟正辛烷	711	803	710	395	471	687	554
1*H*-全氟正壬烷	827	894	823	454	521	794	663
1*H*-全氟正癸烷	922	978	910	512	581	902	759

表 17-3 氯代烷烃保留指数（一）[2]

柱温：90℃

化合物 \ 固定液	PEG-20M	Apiezon L	化合物 \ 固定液	PEG 20M	Apiezon L
1-氯戊烷	953	762	1,1-二氯己烷	1240	989
1-氯己烷	1050	857	1,2-二氯己烷	1311	1005
1-氯庚烷	1151	958	1,3-二氯己烷	1347	1028
1-氯辛烷	1251	1059	1,4-二氯己烷	1419	1058
1-氯壬烷	1350	1159	1,5-二氯己烷	1456	1072
2-氯戊烷	884	712	1,6-二氯己烷	1536	1129
2-氯己烷	978	809	2,2-二氯己烷	1136	925
2-氯庚烷	1077	908	2,3-二氯己烷(赤)	1231	965
2-氯辛烷	1177	1006	2,3-二氯己烷(苏)	1264	980
2-氯壬烷	1275	1106	2,4-二氯己烷	1214	964
3-氯戊烷	892	721		1276	985
3-氯己烷	974	812	2,5-二氯己烷	1333	995
3-氯庚烷	1069	906		1351	1005
3-氯辛烷	1166	1006	3,3-二氯己烷	1114	944
3-氯壬烷	1264	1106	3,4-二氯己烷(赤)	1218	971
4-氯庚烷	1051	900	1-氯-2-甲基戊烷	—	823
4-氯辛烷	1149	997	1-氯-2-甲基己烷	—	921
4-氯壬烷	1245	1094	1-氯-2-甲基庚烷	-	1019
5-氯壬烷	1243	1092	1-氯-4-甲基戊烷	—	823
1,1-二氯戊烷	1144	889	1-氯-6-甲基庚烷		1021
1,2-二氯戊烷	1218	909	2-氯-2-甲基戊烷	—	763
1,3-二氯戊烷	1272	940	2-氯-2-甲基己烷	—	855
1,4-二氯戊烷	1337	959	2-氯-2-甲基庚烷	—	949
1,5-二氯戊烷	1444	1028	2-氯-4-甲基戊烷	—	800
2,2-二氯戊烷	1043	831	4-氯-2-甲基庚烷	—	981
2,3-二氯戊烷(赤)	1150	877	2-氯-6-甲基庚烷	—	966
2,3-二氯戊烷(苏)	1192	895	3-氯-2-甲基戊烷	—	763
2,4-二氯戊烷	1158	867	3-氯-2-甲基己烷		850
	1191	889	3-氯-2-甲基庚烷	—	947
3,3-二氯戊烷	1074	857	3-氯-6-甲基庚烷	—	966

表 17-4 氯代烷烃保留指数（二）[4]

固定液	Apiezon L			磷酸三甲苯酯			Carbowax 20M		
化合物 \ 柱温/℃	75	100	125	75	100	125	75	100	125
1-氯戊烷	810	800	808	858	877	879	943	938	945
2-氯戊烷	763	762	768	806	818	818	874	869	880
3-氯戊烷	770	762	768	816	824	834	878	880	900
1-氯己烷	897	897	908	968	979	981	1041	1034	1041
2-氯己烷	854	857	865	908	917	920	967	959	969
3-氯己烷	856	858	865	913	918	923	965	967	982
1-氯庚烷	991	999	1008	1073	1083	1083	1142	1135	1150
2-氯庚烷	971	953	959	1008	1018	1020	1064	1055	1065
3-氯庚烷	945	943	960	1009	1017	1019	1057	1057	1074
4-氯庚烷	941	949	959	993	1014	1016	1052	1044	1058
1-氯辛烷	1085	1098	1109	1185	1090	1186	1242	1217	1232

续表

固定液	Apiezon L			磷酸三甲苯酯			Carbowax 20M		
I 柱温/℃ 化合物	75	100	125	75	100	125	75	100	125
1-氯-2-甲基丁烷	796	778	786	829	845	840	391	898	900
1-氯-3-甲基丁烷	779	768	776	848	830	834	886	880	900
2-氯-2-甲基丁烷	731	710	732	755	768	789	837	826	849
1-氯-2-甲基戊烷	867	871	880	927	934	940	979	988	1000
2-氯-2-甲基戊烷	811	807	820	870	892	858	899	898	916
3-氯-2-甲基戊烷	845	850	862	911	905	905	944	952	956
3-氯-3-甲基戊烷	839	840	841	883	902	900	939	944	956
1-氯-3,3-二甲基丁烷	831	832	841	880	890	892	936	936	945
2-氯-2,3-二甲基丁烷	830	831	836	860	877	873	919	927	916

表 17-5 C_4～C_6 二氯烷烃保留指数[5]

固定液：Carbowax 400

I 柱温/℃ 化合物	80	100	120	I 柱温/℃ 化合物	80	100	120
内消旋-2,3-二氯丁烷	810	—	—	苏-2,3-二氯戊烷	—	913	—
外消旋-2,3-二氯丁烷	831	—	—	内消旋-3,4-二氯己烷	—	—	980
赤-2,3-二氯戊烷	—	885	—	外消旋-2,3-二氯己烷	—	—	1010

表 17-6 氯代烃保留指数[57]

固定液：角鲨烷　　柱温：80℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
氯甲烷	329	三氯甲烷	582	1,1,2-三氯乙烯	686
氯乙烷	416	2-氯丁烷	589	1-氯-3-甲基丁烷	696
2-氯丙烷	479	1-氯-2-甲基丙烷	595	1,1,2-三氯乙烷	729
二氯甲烷	486	1,2-二氯乙烷	605	1,1,2,2-四氯乙烯	806
1-氯丙烷	524	1,1,1-三氯乙烷	619	1,1,2,2-四氯乙烷	865
反-1,2-二氯乙烯	555	四氯甲烷	648		

表 17-7 碘代烷烃保留指数[27]

固定液	Carbowax 20M	磷酸三甲苯酯	固定液	Carbowax 20M	磷酸三甲苯酯
I 柱温/℃ 化合物	75	100	I 柱温/℃ 化合物	75	100
1-碘丁烷	1065	986	1-碘-3-甲基丁烷	1108	1038
2-碘丁烷	1019	945	2-碘-2-甲基丁烷	1092	1032
1-碘戊烷	1160	1088	2-碘-3-甲基丁烷	1095	1031
2-碘戊烷	1092	1031	1-碘-4-甲基戊烷	1213	1148
3-碘戊烷	1093	1045	2-碘-3-甲基戊烷	1177	1131
1-碘己烷	1257	1190	3-碘-2-甲基戊烷	1170	1125
2-碘己烷	1186	1129	1-碘-2-甲基戊烷	1204	1145
3-碘己烷	1182	1129	1-碘-3-甲基戊烷	1214	1150
1-碘庚烷	1353	1292	2-碘-4-甲基戊烷	1171	1126
2-碘庚烷	1280	1227	3-碘-3-甲基戊烷	1179	1131
3-碘庚烷	1270	1224	2-碘-2-甲基戊烷	1171	1127
4-碘庚烷	1265	1210	1-碘-3,3-二甲基丁烷	1146	1084
1-碘-2-甲基丁烷	1120	1054			

表 17-8 卤代烃保留指数（一）[114]

固定液：$C_{87}H_{176}$

化合物 \ I \ 柱温/℃	70	130	190	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	化合物 \ I \ 柱温/℃	70	130	190	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
1-氯丙烷	526.9	536.4	515.9	1.58	碘甲烷	528.6	548.8	569.0	3.36
1-氯丁烷	630.4	641.4	652.4	1.84	碘乙烷	617.6	638.9	660.2	3.55
1-氯戊烷	732.2	743.3	754.4	1.85	1-碘丙烷	720.3	743.8	767.3	3.92
1-氯己烷	833.3	844.8	856.3	1.91	1-碘丁烷	819.3	844.6	869.9	4.21
1-氯庚烷	934.5	946.3	958.1	1.97	1-碘戊烷	917.8	944.6	971.4	4.47
1-氯辛烷	—	1047.4	1059.5	2.02	1-碘己烷		1045.1	1072.9	4.63
1-氯壬烷		1146.3	1160.3	2.33	1-碘庚烷	—	1144.9	1173.6	4.79
1-氯癸烷	—	1246.9	1260.9	2.34	1-碘辛烷	—	1247.2	1275.2	4.67
溴乙烷	509.6	523.0	—	2.24	二氯甲烷	497.9	509.1		1.86
1-溴丙烷	614.2	629.4	644.6	2.53	三氯甲烷	595.2	610.3	625.4	2.51
1-溴丁烷	716.8	732.7	748.6	2.65	四氯化碳	663.1	681.8	700.5	3.12
1-溴戊烷	817.7	835.0	852.3	2.88	二溴甲烷	681.7	706.2	730.7	4.08
1-溴己烷	918.3	936.4	954.5	3.02	三溴甲烷	873.1	912.9	952.7	6.41
1-溴庚烷		1036.2	1056.8	3.43	氟代苯	651.3	665.9	680.5	2.44
1-溴辛烷		1136.3	1157.6	3.55	氯代苯	838.1	866.1	893.8	4.61
1-溴壬烷	—	1235.2	1258.0	3.80	溴代苯	925.8	961.1	996.4	5.89
1-溴癸烷	—	1334.5	1356.0	3.92	碘代苯		1081.1	1125.7	7.43

表 17-9 卤代烃保留指数（二）[56]

固定液	OV-1			SP 1000		
化合物 \ I \ 柱温/℃	75	100	125	75	100	125
CH_3CHCl_2	565.53	567.76	569.50	886.92	900.52	901.48
$CH_2{=}CCl_2$	516.86	517.31	519.14	734.18	744.91	750.44
$ClCH{=}CCl_2$	691.37	696.32	701.98	1007.14	1010.70	1012.45
$Cl_2C{=}CCl_2$	803.74	808.62	814.23	1036.20	1050.23	1059.96
CCl_4	661.99	667.41	672.72	886.54	900.66	902.20
$ClCH_2CH_2Cl$	633.04	637.87	641.22	1077.64	1084.20	1084.96
$CHCl_3$	602.01	604.40	608.30	1027.69	1030.11	1028.95
$CHBr_2Cl$	774.89	782.75	791.53	1304.75	1316.36	1322.01
$CHBrCl_2$	689.64	694.66	701.52	1167.37	1174.75	1175.89
$CHBr_3$	859.27	870.35	881.85	1441.60	1456.67	1467.06
CH_3CCl_3	640.49	645.92	650.55	897.56	904.35	909.11
CH_2Cl_2	518.46	519.10	519.69	926.65	935.70	932.62
CH_3CH_2I	607.41	614.11	621.29	896.49	901.65	899.84
顺 $BrCH{=}CHBr$	758.31	766.32	774.33	1252.54	1266.33	1274.70
反-$BrCH{=}CHBr$	730.02	737.78	744.26	1139.04	1150.25	1157.92
$BrCH_2CH_2Br$	786.61	795.11	804.57	1267.79	1286.00	1299.71
$Cl_2CHCHCl_2$	957.20	965.19	977.64	1431.59	1443.17	1454.62
CH_3I	518.17	523.44	527.94	818.02	804.33	802.99
Cl_3CCH_2Cl	832.79	840.00	849.97	1267.53	1276.65	1283.29
反 $ClCH{=}CHCl$	557.17	558.38	559.15	863.21	867.61	866.47
顺-$ClCH{=}CHCl$	597.20	597.65	598.01	998.32	1003.60	1003.47
$BrCH_2CH_2Cl$	707.95	715.60	722.81	1174.97	1186.26	1192.67
CH_2I_2	894.78	902.89	911.06	—	1510.47	1522.16

续表

固定液	OV-1			SP-1000		
化合物 \ 柱温/°C	75	100	125	75	100	125
$CBrCl_3$	754.13	761.99	772.19	1075.59	1087.48	1101.23
$C_2H Br$	516.86	523.78	529.14	777.51	792.57	795.81
$Cl_2CHCHCl_2$	882.09	887.76	895.27	1511.30	1513.66	1515.59
$Br_2CHCHBr_2$	1205.66	1225.59	1244.51	—		
CH_2BrCl	601.95	606.87	610.98	1057.80	1064.58	1066.29
CH_2ClI	703.85	712.35	718.31	1212.53	1224.18	1231.23
CH_2Br_2	683.19	690.17	697.85	1175.95	1189.98	1196.47
Cl_3CCCl_3	1052.72	1067.53	1081.31	1426.53	1444.17	1461.57
CBr_4	1034.75	1045.56	1059.63	—	1677.81	1690.77
CHI_3	1172.55	1195.98	1221.27	—	—	—
ICH_2CH_2I	983.67	1001.98	1014.87	—	—	—
CH_3CH_2Cl	431.12	431.17	431.23	661.48	661.08	661.45

表 17-10 卤代烃保留指数（三）[50]

固定液：$C_{78}H_{158}$+$C_{77}H_{155}OH$　　柱温：130℃

化合物	*I*	化合物	*I*	化合物	*I*
1-氯丁烷	639.7	1-溴丁烷	732.0	四氯甲烷	680.2
1-氯戊烷	742.4	1-溴戊烷	834.4	氟代苯	666.4
1-氯己烷	843.8	1-溴己烷	935.4	氯代苯	865.7
1-氯庚烷	945.2	1-溴庚烷	1036.3	溴代苯	960.9
1-氯辛烷	1046.4	二氯甲烷	508.0	3-氯吡啶	886.7
1-溴丙烷	628.8	三氯甲烷	610.1	1,1,1-三氟癸烷	922.1

表 17-11 卤代烃保留指数（四）[54]

固定液：$C_{78}H_{158}$　　柱温：130℃

化合物	*I*	化合物	*I*	化合物	*I*
1-氟戊烷	557.1	1-氯己烷	842.9	二氟二溴甲烷	481.4
1-氟己烷	658.0	1-溴丙烷	627.1	氟苯	664.6
1-氟辛烷	859.6	1-溴丁烷	730.4	六氟苯	518.7
1,1,1-三氟辛烷	720.0	1-溴戊烷	832.7	三氟甲基苯	656.4
1,1,1-三氟癸烷	918.5	二氯甲烷	504.9	氯苯	864.5
1-氯丁烷	639.5	三氯甲烷	606.8	溴苯	959.6
1-氯戊烷	741.7	四氯甲烷	680.7		

表 17-12 二卤代烷烃保留指数[5]

固定液	Apiezon L+有机皂土-34			Carbowax 400		
化合物 \ 柱温/°C	120	140	145	80	100	120
内消旋 2,3-二氯丁烷	595	—	—	810	—	—
外消旋 2,3-二氯丁烷	671	—	—	830		-
内消旋 2,3-二溴丁烷	764	—	—	—	-	
外消旋 2,3-二溴丁烷	813	—	—	—	-	—
赤-2,3-二氯戊烷	-	666	—	-	885	-
苏-2,3-二氯戊烷	-	753	—	-	913	—

续表

固定液	Apiezon L＋有机皂土 34			Carbowax 400		
I 柱温/℃ 化合物	120	40	145	80	100	120
赤-2,3-二溴戊烷		846	—	—	—	—
苏-2,3-二溴戊烷	—	913	—	—	—	—
内消旋-3,4-二氯己烷			755	—		980
外消旋-3,4-二氯己烷	—		837			1010
内消旋-3,4-二溴己烷			931	—	—	—
外消旋-3,4-二溴己烷		—	988	—	—	—

表 17-13　卤代烃及卤代苯甲醚保留指数（一）[53]

固定液	$C_{87}H_{176}$烷	Carbowax 20M	四(2-氰乙氧基)-丁烷	固定液	$C_{87}H_{176}$烷	Carbowax 20M	四(2-氰乙氧基)-丁烷
I 柱温/℃ 化合物	150		180	I 柱温/℃ 化合物	150		180
苯	687	971	1336	苯甲醚	1009	1288	1653
氟代苯	680	996	1341	溴代环己烷	1117	1405	1771
氯代苯	880	1231	1584	碘代环己烷	928	1340	1788
溴代苯	974	1351	1737	氟代苯甲醚	916	1367	1791
碘代苯	1088	1504	1917	氯代苯甲醚	1120	1592	2057
环己烷	680	740	1143	溴代苯甲醚	1212	1706	2210
氟代环己烷	735	990	1379	碘代苯甲醚	1326	1852	2390
氯代环己烷	918	1173	1516				

表 17-14　卤代烃及卤代苯甲醚保留指数（二）[55]

固定液	$C_{87}H_{176}$	Carbowax 20M	四(2-氰乙氧基)-丁烷	固定液	$C_{87}H_{176}$	Carbowax 20M	四(2-氰乙氧基)-丁烷
I 柱温/℃ 化合物	150	150	180	I 柱温/℃ 化合物	150	150	180
苯	687	971	1336	溴代环己烷	1009	1288	1653
氟代苯	680	996	1341	碘代环己烷	1117	1405	1771
氯代苯	880	1231	1584	苯甲醚	928	1340	1788
溴代苯	974	1351	1737	氟代苯甲醚	916	1367	1791
碘代苯	1088	1504	1917	氯代苯甲醚	1120	1592	2057
环己烷	680	740	1143	溴代苯甲醚	1212	1706	2210
氟代环己烷	735	990	1379	碘代苯甲醚	1326	1852	2390
氯代环己烷	9_8	1173	1516				

表 17-15　氯代苯保留指数（一）[2]

固定液：有机皂土-34－DC-200　　柱温：150℃

化合物	I
苯	710
氯苯	930
对二氯苯	1052
间二氯苯	1088
邻二氯苯	1165

表 17-16　氯代苯保留指数（二）[2]

固定液：有机皂土-34＋DC-200　　柱温：150℃

化合物	I
苯	794
氯苯	1053
1,3,5-三氯苯	1205
1,2,4-三氯苯	1330
1,2,3-三氯苯	1554

表 17-17 氯代苯保留指数（三）[4]

固定液	聚乙二醇1500	磷酸三甲苯酯	聚己二酸二乙二醇酯		吐温80		ПФЭ-5Ф4Э	
I 柱温/℃ 化合物	160	170	160	170	160	170	160	170
氯苯	1217	1096	1293	1276	1157	1200	1078	1057
1,3-二氯苯	1400	1275	1475	1483	1315	1398	1229	1233
1,4-二氯苯	1412	1285	1488	1497	1325	1408	1238	1243
1,2-二氯苯	1452	1335	1533	1549	1365	1457	1279	1283
1,3,5-三氯苯	1574	1466	1664	1708	1487	1603	1387	1412
1,2,4-三氯苯	1603	1490	1689	1733	1506	1632	1408	1440
1,2,3-三氯苯	1632	1529	1726	1784	1540	1672	1440	1475
1,2,4,5-四氯苯	1726	1622	1820	1898	1620	1738	1517	1567
1,2,3,5-四氯苯	1738	1648	1881	1950	1672	1849	1567	1629
1,2,3,4-四氯苯	1829	1737	1925	2032	1732	1904	1614	1676

表 17-18 氯代苯保留指数（四）[58]

柱温：160℃

I 固定液 化合物	SE-30	Carbowax 20M	I 固定液 化合物	SE-30	Carbowax 20M
一氯苯	832	1257	1,2,3-三氯苯	1211	1705
1,3-二氯苯	964	1415	1,2,3,5-四氯苯	1326	1754
1,4-二氯苯	970	1438	1,2,4,5-四氯苯	1326	1764
1,2-二氯苯	1005	1445	1,2,3,4-四氯苯	1366	1871
1,3,5-三氯苯	1131	1515	五氯苯	1496	1956
1,2,4-三氯苯	1177	1630	六氯苯	1656	2141

表 17-19 氯代苯保留指数（五）[12]

固定液：OV-225　　柱温：100℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
邻二氯苯	1309	1,2,4-三氯苯	1441	*N*,*N*-二甲基邻甲苯胺	1299
间二氯苯	1245	1,3,5-三氯苯	1344	*N*,*N*-二甲基间甲苯胺	1491
对二氯苯	1264	1,2,3,5-四氯苯	1555	*N*,*N*-二甲基对甲苯胺	1479
1,2,3-三氯苯	1501	1,2,4,5-四氯苯	1583		

表 17-20 氯代苯保留指数（六）[23]

固定液	SE-30				Carbowax 20M		
I 柱温/℃ 化合物	120	140	160	180	140	160	180
氯苯	832	836	840	842	1257	1270	1289
1,3-二氯苯	964	1013	1016	1021	1415	1434	1509
1,4-二氯苯	970	1015	1016	1021	1438	1471	1529
1,2-二氯苯	1005	1038	1050	1057	1447	1514	1575
1,3,5-三氯苯	1131	1144	1150	1159	1515	1545	1590
1,2,4-三氯苯	1177	1183	1193	1207	1630	1653	1698
1,2,3-三氯苯	1211	1217	1228	1247	1705	1735	1775
1,2,3,5-四氯苯	1326	1329	1344	1367	1754	1786	1824
1,2,4,5-四氯苯	1326	1329	1344	1367	1764	1793	1830
1,2,3,4-四氯苯	1366	1371	1388	1412	1871	1908	1941
五氯苯	1496	1505	1525	1552	1956	1999	2027
六氯苯	1656	1673	1595	1723	2124	2178	2204

表 17-21 氯代苯保留指数（七）[12]

固定液：OV-7　　柱温：100℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
邻硝基甲苯	1239	间氯甲苯	1007	对氯苯胺	1282
间硝基甲苯	1277	对氯甲苯	1010	1,2,3-三氯苯	1270
对硝基甲苯	1293	邻氯苄腈	1263	1,2,4-三氯苯	1237
邻甲基苯甲醚	1064	间氯苄腈	1218	1,3,5-三氯苯	1182
间甲基苯甲醚	1076	对氯苄腈	1235	1,2,3,5-四氯苯	1378
对甲基苯甲醚	1077	邻氯苯胺	1203	1,2,4,5-四氯苯	1378
邻氯甲苯	1003	间氯苯胺	1281		

表 17-22 溴代苯保留指数[1]

固定液：有机皂土-34＋硅油 DC-200

柱温：160℃

化合物	I
苯	715
溴苯	1045
对二溴苯	1230
间二溴苯	1290
邻二溴苯	1380

表 17-23 卤代苯保留指数（一）[6]

固定液：有机皂土-34＋DC-200

柱温：140℃

化合物	I
苯	801
1-氯-4-氟代苯	928
1-氯-3-氟代苯	1000
氯苯	1050
1-氯-2-氟代苯	1110

表 17-24 卤代苯保留指数（二）[3]

固定液：有机皂土-34＋DC-200　　柱温：160℃

化合物	I	化合物	I
苯	837	1-溴-3-氯苯	1326
氯苯	1077	1-溴-2-氯苯	1451
1-溴-4-氯苯	1227		

表 17-25 卤代甲苯保留指数[12]

固定液：Reoplex 400　　柱温：100℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
邻氯甲苯	1133	邻溴甲苯	1494	*N*,*N*-二甲基邻甲苯胺	1481
间氯甲苯	1144	间溴甲苯	1510	*N*,*N*-二甲基间甲苯胺	1708
对氯甲苯	1146	对溴甲苯	1511	*N*,*N*-二甲基对甲苯胺	1695

表 17-26 氯代苯化合物保留指数[36]

固定液	Apiezon M			Ucon LB 550X			OV-210		
I 柱温/℃ 化合物	130	140	150	130	140	150	130	140	150
1,4-二甲苯	966	970	972	972	977	979	999	1000	1000
2-氯-1,4-二甲苯	1183	1188	1193	1185	1190	1195	1231	1237	1244
1-(氯甲基)-4-甲苯	1257	1261	1267	1282	1287	1291	1344	1351	1359
2,5-二氯-1,4-二甲苯	1368	1374	1381	1364	1369	1376	1415	1423	1433
2,3-二氯-1,4-二甲苯	1412	1418	1425	1401	1408	1415	1467	1477	1487
2-氯-1-(氯甲基)-4-甲苯	1455	1460	1465	1463	1468	1474	1542	1552	1561
3-氯-1-(氯甲基)-4-甲苯	1470	1475	1481	1483	1488	1494	1552	1561	1570
1,4-双(氯甲基)苯	1567	1570	1577	1601	1602	1608	1681	1691	1699
2,3,5-三氯-1,4-二甲苯	1574	1581	1591	1552	1559	1567	1616	1628	1638

表 17-27 氯代二甲苯保留指数[48]

柱温：115℃

化合物 \ I \ 固定液	角鲨烷	SE-54	Ucon LB 550X	磷酸三(2,4-二甲苯)酯
[$^2H_{10}$]-1,4-二甲苯	858	880	964	1013
1,4-二甲苯	865	886	970	1020
[$^2H_9$]-2-氯-1,4-二甲苯	1044	1071	1174	1246
2-氯-1,4-二甲苯	1051	1077	1180	1253
[$^2H_9$]-1-(氯甲基)-4-甲苯	1074	1130	1272	1361
1-(氯甲基)-4-甲苯	1080	1136	1277	1367
[$^2H_8$]-2,5-二氯-1,4-二甲苯	1213	1236	1350	1437
2,5-二氯-1,4-二甲苯	1220	1242	1356	1444
[$^2H_8$]-2,3-二氯-1,4-二甲苯	1231	1267	1387	1487
2,3-二氯-1,4-二甲苯	1237	1273	1393	1493
[$^2H_8$]-2-氯-1-(氯甲基)-4-甲苯	1240	1297	1151	1565
2-氯-1-(氯甲基)-4-甲苯	1247	1303	1456	1571
[$^2H_8$]-3-氯-1-(氯甲基)-4-甲苯	1249	1310	1471	1584
3-氯-1-(氯甲基)-4-甲苯	1256	1315	1476	1590
[$^2H_8$]-1,4-双(氯甲基)苯	1288	1381	1587	1711
1,4-双(氯甲基)苯	1294	1389	1591	1722
[$^2H_7$]-2,3,5-三氯-1,4-二甲苯	1390	1416	1534	1643
2,3,5-三氯-1,4-二甲苯	1406	1422	1540	1649

表 17-28 氯乙苯保留指数[15]

固定液	SE 301		Apiezon L		PEG-20M	
化合物 \ I \ 柱温/℃	140	160	150	170	150	170
邻氯乙苯	1038	1050	1071	1095	1439	1470
对氯乙苯	1055	1067	1088	1111	1460	1495
2,6-二氯乙苯	1161	1180	1202	1228	1616	1643
2,5-二氯乙苯	1196	1213	1243	1263	1658	1689
3,4-二氯乙苯	1241	1256	1281	1308	1718	1746
2,4,5-三氯乙苯	1349	1366	1394	1440	1863	1890
2,3,4-三氯乙苯	1403	1423	1458	1478	1940	1973
2,3,5-三氯乙苯	1503	1523	1554	1583	2078	2117

第二节 含卤素酯类的保留指数

表 17-29 全氟脂肪酸甲酯保留指数[17]

柱温：100℃

化合物 \ I \ 固定液	正二十八烷	聚氯三氟乙烯	化合物 \ I \ 固定液	正二十八烷	聚氯三氟乙烯
己酸甲酯	806	—	全氟辛酸甲酯	549	1019
庚酸甲酯	905	—	全氟壬酸甲酯	593	1110
辛酸甲酯	1012	—	全氟癸酸甲酯	638	1206
壬酸甲酯	1112	—	*ω-H*-全氟庚酸甲酯	614	1022
癸酸甲酯	1209	—	*ω-H*-全氟壬酸甲酯	708	1213
全氟己酸甲酯	466	829	*ω-H*-全氟十一酸甲酯	800	1403
全氟庚酸甲酯	505	927			

表 17-30 全氟脂肪酸酯保留指数[17]

柱温：100℃

I 固定液 / 化合物	正二十八烷	SE-52	聚氯三氟乙烯	Carbowax 20M	DEGS	EGS	聚丙三醇
全氟辛酸甲酯	550	699	1019	683	773	807	993
全氟辛酸乙酯	619	766	1081	698	839	850	1073
全氟辛酸丙酯	717	855	1166	768	973	945	1184
全氟壬酸甲酯	593	760	1110	721	852	884	1101
全氟癸酸甲酯	638	810	1206	770	936	962	1190

表 17-31 全氟二脂肪酸二甲酯保留指数[17]

柱温：120℃

I 固定液 / 化合物	正二十八烷	SE-52	DEGS	I 固定液 / 化合物	正二十八烷	SE-52	DEGS
全氟二丁酸二甲酯	692	871	1620	二丁酸二甲酯	876	1025	1918
全氟二戊酸二甲酯	737	930	1619	二戊酸二甲酯	1000	1131	2024
全氟二己酸二甲酯	784	990	1627	二己酸二甲酯	1104	1240	2241

表 17-32 五氟苯甲酸酯保留指数[42]

固定液	SE-30			OV-351		
I 柱温/℃ / 化合物	140	160	180	140	160	180
五氟苯甲酸甲基乙基酯	1068	1085	1063	1330	1326	1288
五氟苯甲酸-1-甲基丙基酯	1170	1177	1165	1424	1421	1408
五氟苯甲酸-2-甲基丙基酯	1186	1192	1178	1460	1457	1440
五氟苯甲酸-1,2-二甲基丙基酯	1241	1246	1237	1490	1485	1475
五氟苯甲酸-1-甲基丁基酯	1253	1257	1247	1506	1498	1483
五氟苯甲酸-3-甲基丁基酯	1283	1286	1285	1559	1558	1541
五氟苯甲酸-2-丙烯基酯	1113	1121	1104	1470	1474	1463
五氟苯甲酸-2-丙炔基酯	1122	1127	1107	1682	1676	1664
五氟苯甲酸-3-丁烯基酯	1207	1211	1198	1562	1561	1548
五氟苯甲酸-1-甲基-3-丁烯基酯	1242	1246	1233	1540	1541	1536
五氟苯甲酸-反-2-丁烯基酯	1228	1233	1216	1586	1586	1574
五氟苯甲酸-4-戊烯基酯	1308	1312	1300	1663	1663	1658
五氟苯甲酸-反-3-己烯基酯	1408①	1414①	1404①	1745	1746	1743
五氟苯甲酸-顺-3-己烯基酯	1408①	1414①	1404①	1746	1747	1743

①顺式与反式异构体未分离开。

表 17-33 五氟苯甲酸 $C_1 \sim C_{12}$ 酯保留指数[46]

固定液	SE-30				OV-351			
I 柱温/℃ / 化合物	140	160	180	200	140	160	180	200
五氟苯甲酸甲酯	946	957	982	992	1305	1308	1299	1260
五氟苯甲酸乙酯	1025	1032	1055	1071	1343	1347	1328	1271
五氟苯甲酸丙酯	1126	1134	1149	1162	1423	1426	1419	1360
五氟苯甲酸丁酯	1221	1225	1233	1248	1517	1519	1507	1456
五氟苯甲酸戊酯	1319	1321	1328	1340	1608	1611	1595	1564
五氟苯甲酸己酯	1417	1419	1426	1433	1704	1705	1688	1673
五氟苯甲酸庚酯	1517	1517	1519	1526	1802	1801	1788	1778
五氟苯甲酸辛酯	1615	1615	1618	1620	1899	1899	1888	1877
五氟苯甲酸壬酯	1714	1713	1716	1716	1997	1999	1985	1980
五氟苯甲酸癸酯	1812	1811	1814	1815	2089	2100	2085	2082
五氟苯甲酸十一酯	1910	1909	1912	1916	2185	2199	2185	2182
五氟苯甲酸十二酯	2010	2010	2011	2014	2292	2300	2287	2284

表 17-34　多氟代羧酸酯保留指数[64]

固定液		XE-60		OV-101		固定液		XE-60		OV-101	
保留指数 柱温/℃ 化合物		70	$\frac{\partial I}{\partial T}$	100	$\frac{\partial I}{\partial T}$	保留指数 柱温/℃ 化合物		70	$\frac{\partial I}{\partial T}$	100	$\frac{\partial I}{\partial T}$
		I		I				I		I	
$R_F(CO)OC_mH_{2m+1}$						$R_F(CO)OC_mH_{2m+1}$					
R_F	m					R_F	m				
CF_3	1	591.4	0.37	400.4	0.29	C_4F_9	1	668.0	0.22	538.6	0.30
	2	648.5	0.45	473.8	0.40		2	722.2	0.33	611.5	0.37
	3	733.8	0.65	558.6	0.51		3	802.3	0.52	695.6	0.47
	4	827.5	0.81	654.2	0.58		4	889.8	0.70	787.3	0.51
	5	925.9	0.93	752.1	0.64		5	983.4	0.85	881.6	0.54
	6	1024.9	0.98	851.5	0.71		6	1080.0	0.88	975.9	0.61
C_2F_5	1	594.6	0.32	437.2	0.32	C_5F_{11}	1	708.6	0.19	595.7	0.35
	2	649.8	0.41	510.4	0.37		2	762.3	0.29	666.4	0.43
	3	733.9	0.62	592.0	0.45		3	842.2	0.47	750.5	0.48
	4	825.3	0.79	685.3	0.53		4	929.3	0.67	842.2	0.53
	5	921.9	0.91	780.7	0.59		5	1022.5	0.83	935.6	0.58
	6	1020.0	0.95	878.2	0.63		6	1118.2	0.85	1030.5	0.62
C_3F_7	1	628.6	0.26	482.6	0.19	C_6F_{13}	1	750.2	0.16	653.2	0.34
	2	683.6	0.38	559.2	0.32		2	803.8	0.29	723.8	0.39
	3	766.0	0.57	642.4	0.40		3	883.3	0.46	807.2	0.43
	4	854.9	0.74	734.6	0.49		4	970.1	0.66	898.4	0.48
	5	949.5	0.88	829.9	0.56		5	1062.6	0.82	991.4	0.54
	6	1046.6	0.91	926.2	0.62		6	1157.5	0.84	1085.3	0.58

表 17-35　氯代乙酸酯保留指数[24]

固定液	SE-30			OV-351			
I 柱温/℃ 化合物	100	140	180	100	120	140	160
乙酸甲酯	560	-	—	—	—	—	-
乙酸乙酯	642	—	—	—		—	—
乙酸丙酯	729	651	647	1061	897	—	—
乙酸丁酯	818	755	716	1115	1042	1008	953
乙酸戊酯	912	863	853	1176	1165	1147	1100
乙酸己酯	1006	978	972	1255	1274	1265	1230
乙酸庚酯	1099	1083	1083	1347	1377	1373	1294
乙酸辛酯	1194	1191	1195	1448	1479	1478	1453
氯乙酸甲酯	768	701	648	1251	1269	1265	1270
氯乙酸乙酯	832	768	771	1282	1307	1279	1305
氯乙酸丙酯	920	886	886	1355	1384	1379	1378
氯乙酸丁酯	1014	994	1000	1447	1479	1478	1472
氯乙酸戊酯	1106	1097	1106	1547	1578	1581	1575
氯乙酸己酯	1200	1201	1216	1652	1676	1681	1668
氯乙酸庚酯	1296	1305	1319	1761	1774	1780	1769
氯乙酸辛酯	1394	1407	1420	1871	1874	1881	1866
二氯乙酸甲酯	835	792	786	1337	1366	1365	1325
二氯乙酸乙酯	904	871	876	1354	1382	1380	1378
二氯乙酸丙酯	991	976	987	1425	1459	1460	1428
二氯乙酸丁酯	1081	1072	1088	1514	1548	1551	1528
二氯乙酸戊酯	1173	1175	1192	1614	1642	1648	1627
二氯乙酸己酯	1268	1278	1298	1719	1738	1745	1728
二氯乙酸庚酯	1364	1380	1399	1827	1834	1843	1826
二氯乙酸辛酯	1463	1481	1501	1937	1930	1941	1925
三氯乙酸甲酯	912	897	896	1320	1352	1358	1320
三氯乙酸乙酯	981	966	965	1333	1366	1365	1330
三氯乙酸丙酯	1064	1063	1074	1396	1434	1441	1422
三氯乙酸丁酯	1153	1161	1173	1480	1519	1528	1511
三氯乙酸戊酯	1245	1260	1277	1573	1609	1620	1608
三氯乙酸己酯	1340	1359	1380	1674	1764	1715	1703
三氯乙酸庚酯	1437	1478	1480	1781	1799	1812	1802
三氯乙酸辛酯	1535	1558	1578	1889	1894	1910	1900

表 17-36 卤代乙酸酯保留指数（一）[20]

固定液：OV-101　　柱温：80℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
乙酸甲酯	525.9	二氯乙酸丁酯	1069.8	一溴乙酸异丙酯	916.2
乙酸乙酯	595.7	二氯乙酸戊酯	1166.9	一溴乙酸异丁酯	1025.8
乙酸丙酯	695.8	二氯乙酸己酯	1267.0	一溴乙酸异戊酯	1127.9
乙酸丁酯	796.4	二氯乙酸异丙酯	920.8	一碘乙酸甲酯	886.0
乙酸戊酯	896.5	二氯乙酸异丁酯	1028.8	一碘乙酸乙酯	960.5
乙酸己酯	996.6	二氯乙酸异戊酯	1129.6	一碘乙酸丙酯	1056.8
乙酸异丙酯	646.8	三氯乙酸甲酯	895.5	一碘乙酸丁酯	1153.5
乙酸异丁酯	757.2	三氯乙酸乙酯	961.7	一碘乙酸戊酯	1251.3
乙酸异戊酯	859.7	三氯乙酸丙酯	1051.2	一碘乙酸己酯	1349.9
一氯乙酸甲酯	729.4	三氯乙酸丁酯	1144.5	一碘乙酸异丙酯	999.9
一氯乙酸乙酯	806.4	三氯乙酸戊酯	1240.2	一碘乙酸异丁酯	1111.6
一氯乙酸丙酯	902.5	三氯乙酸己酯	1339.7	一碘乙酸异戊酯	1209.9
一氯乙酸丁酯	1001.4	三氯乙酸异丙酯	995.9	三氟乙酸丙酯	569.6
一氯乙酸戊酯	1100.2	三氯乙酸异丁酯	1103.8	三氟乙酸丁酯	664.3
一氯乙酸己酯	1200.8	三氯乙酸异戊酯	1203.3	三氟乙酸戊酯	761.0
一氯乙酸异丙酯	850.7	一溴乙酸甲酯	800.2	三氟乙酸己酯	858.8
一氯乙酸异丁酯	959.6	一溴乙酸乙酯	873.4	三氟乙酸异丙酯	528.8
一氯乙酸异戊酯	1062.5	一溴乙酸丙酯	969.5	三氟乙酸异丁酯	625.4
二氯乙酸甲酯	811.5	一溴乙酸丁酯	1067.8	三氟乙酸异戊酯	724.9
二氯乙酸乙酯	882.4	一溴乙酸戊酯	1166.7		
二氯乙酸丙酯	974.5	一溴乙酸己酯	1265.8		

表 17-37 卤代乙酸酯保留指数（二）[20]

固定液：OV-101　　柱温：200℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
乙酸己酯	991.1	二氯乙酸辛酯	1484.3	一溴乙酸癸酯	1684.8
乙酸庚酯	1091.7	二氯乙酸壬酯	1584.1	一溴乙酸十二碳酯	1885.3
乙酸辛酯	1189.4	二氯乙酸癸酯	1684.0	一溴乙酸十四碳酯	2086.2
乙酸壬酯	1289.8	二氯乙酸十二碳酯	1884.8	一溴乙酸十六碳酯	2287.6
乙酸癸酯	1389.2	二氯乙酸十四碳酯	2085.3	一碘乙酸己酯	1382.3
乙酸十二碳酯	1589.6	二氯乙酸十六碳酯	2287.0	一碘乙酸庚酯	1481.7
乙酸十四碳酯	1790.6	三氯乙酸己酯	1366.7	一碘乙酸辛酯	1581.2
乙酸十六碳酯	1991.1	三氯乙酸庚酯	1465.1	一碘乙酸壬酯	1681.3
一氯乙酸己酯	1207.5	三氯乙酸辛酯	1563.8	一碘乙酸癸酯	1782.0
一氯乙酸庚酯	1307.0	三氯乙酸壬酯	1663.3	三氟乙酸己酯	830.8
一氯乙酸辛酯	1406.0	三氯乙酸癸酯	1762.7	三氟乙酸庚酯	927.2
一氯乙酸壬酯	1507.2	三氯乙酸十二碳酯	1963.0	三氟乙酸辛酯	1026.3
一氯乙酸癸酯	1607.2	三氯乙酸十四碳酯	2163.5	三氟乙酸壬酯	1123.6
一氯乙酸十二碳酯	1807.2	三氯乙酸十六碳酯	2364.9	三氟乙酸癸酯	1220.0
一氯乙酸十四碳酯	2008.3	一溴乙酸己酯	1284.4	三氟乙酸十二酯	1418.0
一氯乙酸十六碳酯	2209.8	一溴乙酸庚酯	1384.2	三氟乙酸十四酯	1617.4
二氯乙酸己酯	1285.5	一溴乙酸辛酯	1484.1	三氟乙酸十六酯	1816.4
二氯乙酸庚酯	1385.2	一溴乙酸壬酯	1584.6		

表 17-38 卤代脂肪酸酯保留指数[51]

固定液：SP-400 柱温：80℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
丙酸甲酯	626.78	2-氯丙酸异丙酯	896.75	2,2-二氯丙酸丙酯	1014.63
丙酸乙酯	704.69	2-氯丙酸异丁酯	1009.68	2,2-二氯丙酸丁酯	1109.45
丙酸丙酯	803.78	2-氯丙酸异戊酯	1110.34	2,2-二氯丙酸戊酯	1204.33
丙酸丁酯	903.37	3-氯丙酸甲酯	842.95	丁酸甲酯	717.81
丙酸戊酯	1003.05	3-氯丙酸乙酯	920.04	丁酸乙酯	795.17
丙酸异丙酯	748.11	3-氯丙酸丙酯	1018.24	丁酸丙酯	893.23
丙酸异丁酯	863.89	3-氯丙酸丁酯	1117.08	丁酸丁酯	992.26
丙酸异戊酯	966.13	3-氯丙酸戊酯	1215.75	丁酸戊酯	1090.42
2-氯丙酸甲酯	782.91	3-氯丙酸异丙酯	961.77	丁酸异丙酯	838.43
2-氯丙酸乙酯	858.81	3-氯丙酸异丁酯	1077.45	丁酸异丁酯	953.82
2-氯丙酸丙酯	952.56	3-氯丙酸异戊酯	1178.40	丁酸异戊酯	1055.27
2-氯丙酸丁酯	1046.11	2,2-二氯丙酸甲酯	864.13		
2-氯丙酸戊酯	1143.56	2,2-二氯丙酸乙酯	929.53		

表 17-39 氯代丙酸酯保留指数（一）[58]

固定液：SP-400 柱温：200℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
丙酸己酯	1103.35	2-氯丙酸己酯	1253.04	2,2-二氯丙酸壬酯	1622.99
丙酸庚酯	1201.56	2-氯丙酸庚酯	1353.22	2,2-二氯丙酸癸酯	1722.15
丙酸辛酯	1298.14	2-氯丙酸辛酯	1452.09	3-氯丙酸己酯	1324.72
丙酸壬酯	1399.44	2-氯丙酸壬酯	1559.88	3-氯丙酸庚酯	1424.24
丙酸癸酯	1497.70	2-氯丙酸癸酯	1649.76	3-氯丙酸辛酯	1523.35
丙酸十二酯	1699.60	2,2-二氯丙酸己酯	1329.03	3-氯丙酸壬酯	1623.60
丙酸十四酯	1898.60	2,2-二氯丙酸庚酯	1426.56	3-氯丙酸癸酯	1722.99
丙酸十八酯	2098.09	2,2-二氯丙酸辛酯	1524.86		

表 17-40 氯代丙酸酯保留指数（二）[139]

固定液	SE-30						OV-351					
I 柱温/℃ 化合物	60	80	100	120	140	160	60	80	100	120	140	160
2-氯丙酸甲基乙酯	885	880	873	866	886		1229	1226	1233	1264	1337	—
2-氯丙酸二甲基乙酯	921	917	911	905	926	—	1223	1220	1229	1264	1337	—
2-氯丙酸-1-甲基丙酯	979	975	967	960	984	—	1312	1311	1315	1335	1402	—
2-氯丙酸-1,1-二甲基甲酯	1025	1023	1015	1011	1035		1326	1327	1333	1353	1421	—
2-氯丙酸-2-甲基丙酯	994	990	983	976	999	—	1342	1340	1344	1363	1428	—
2-氯丙酸-1,2-二甲基丙酯	1046	1044	1037	1032	1054		1369	1366	1368	1386	1447	—
2-氯丙酸-1-甲基丁酯	1063	1059	1050	1045	1067	—	1387	1386	1389	1404	1460	—
2-氯丙酸-3-甲基丁酯	1092	1089	1080	1075	1097		1443	1443	1444	1458	1514	—
2-氯丙酸-2-丙烯酯		935	914	904	928	949	—	1387	1385	1382	1443	1486
2-氯丙酸-1-甲基-3-丁烯酯	—	1057	1040	1032	1054	1062		1438	1436	1434	1496	1512
2-氯丙酸-3-丁烯酯		1024	1007	998	1020	1030	-	1458	1454	1453	1514	1543
2-氯丙酸-4-戊烯酯	—	1122	1106	1101	1123	1128	—	1552	1554	1546	1604	1625
2-氯丙酸-2-丙炔酯	—	948	924	914	933	953	—	1588	1580	1575	1632	1648
2-氯丙酸-反-3-己烯酯	—	1223	1209	1204	1225	1228	—	1635	1627	1623	1678	1694
2-氯丙酸-顺-3-己烯酯		1226	1213	1208	1229	1232		1645	1637	1634	1690	1706
3-氯丙酸甲基乙酯	952	947	939	930	951	—	1374	1371	1372	1388	1447	—

续表

固定液	SE-30						OV-351					
I 柱温/℃ 化合物	60	80	100	120	140	160	60	80	100	120	140	160
3-氯丙酸二甲基乙酯	991	987	980	973	996	-	1365	1364	1368	1386	1447	—
3-氯丙酸-1-甲基丙酯	1043	1042	1033	1038	1050	—	1461	1459	1460	1471	1523	—
3-氯丙酸-1,1-二甲基丙酯	1095	1093	1085	1081	1105	—	1475	1475	1477	1490	1542	
3-氯丙酸-2-甲基丙酯	1062	1058	1049	1045	1067		1493	1492	1492	1503	1554	—
3-氯丙酸-1,2-二甲基丙酯	1115	1112	1104	1100	1123		1517	1517	1516	1527	1576	
3-氯丙酸-1-甲基丁酯	1132	1128	1119	1114	1135	—	1540	1538	1537	1548	1594	—
3-氯丙酸-3-甲基丁酯	1160	1156	1148	1144	1166	—	1594	1594	1595	1605	1652	—
3-氯丙酸-2-丙烯酯		997	977	968	989	1004	—	1528	1521	1516	1574	1596
3-氯丙酸-1-甲基-3-丁烯酯	—	1124	1107	1102	1123	1128	—	1596	1581	1567	1615	1630
3-氯丙酸-3-丁烯酯	—	1088	1071	1066	1085	1085		1602	1594	1590	1647	1666
3-氯丙酸-4-戊烯酯		1189	1176	1170	1192	1196	—	1708	1698	1695	1749	1763
3-氯丙酸-2-丙炔酯	—	1011	989	978	998	1008		1742	1723	1712	1757	1765
3-氯丙酸-反-3-己烯酯		1286	1275	1272	1290	1293	—	1780	1770	1767	1819	1829
3-氯丙酸-顺-3-己烯酯		1289	1279	1276	1295	1298	—	1790	1780	1779	1833	1841

表 17-41 丙酸酯与氯代丙酸酯保留指数 (·)[37]

固定液：SE-30

I 柱温/℃ 化合物	80	100	120	140	160	180	200	220	240	260
丙酸甲酯	607	627	622	554	—	—	—		--	—
丙酸乙酯	688	692	684	656		—	—	—	-	
丙酸丙酯	807	795	785	729	753	721	—	—		—
丙酸丁酯	901	891	884	845	851	866	—	--		—
丙酸戊酯	995	987	983	959	969	966	—	—		--
丙酸己酯	1090	1084	1081	1069	1068	1068	1082	-		—
丙酸庚酯	1186	1181	1178	1174	1170	1169	1176	1162	1202	--
丙酸辛酯	1282	1280	1276	1277	1272	1270	1267	1246	1263	—
丙酸壬酯	—	1380	1376	1377	1376	1373	1369	1356	1366	
丙酸癸酯		--	1476	1478	1478	1474	1473	1462	1459	—
丙酸十一酯			1575	1578	1578	1577	1576	1564	1572	1580
丙酸十二酯	--		1672	1677	1679	1680	1679	1672	1676	1677
丙酸十四酯	--	—	—	—	1880	1883	1881	1877	1878	1876
丙酸十六酯	-	—	—	—	2079	2085	2081	2079	2081	2075
丙酸十八酯		—	—	—	--	2285	2278	2278	2281	2276
2-氯丙酸甲酯	783	774	756	790	741	721		—	—	—
2-氯丙酸乙酯	851	841	832	800	814	807	—	—	—	—
2-氯丙酸丙酯	941	932	930	903	923	930	—		—	—
2-氯丙酸丁酯	1032	1026	1027	1011	1016	1023	—	—		--
2-氯丙酸戊酯	1126	1122	1122	1118	1115	1119	1160	—	-	--
2-氯丙酸己酯	1221	1220	1219	1221	1219	1224	1216	1200	1234	—
2-氯丙酸庚酯	1316	1318	1316	1320	1321	1323	1318	1300	1339	—
2-氯丙酸辛酯	-	1415	1415	1421	1422	1423	1423	1418	1427	—
2-氯丙酸壬酯	—	—	1515	1521	1524	1525	1527	1520	1535	1552
2-氯丙酸癸酯		-	1612	1620	1623	1627	1629	1625	1635	1644
2-氯丙酸十一酯	--		-	1719	1725	1729	1729	1728	1736	1738
2-氯丙酸十二酯	—	--	--	1817	1825	1830	1832	1831	1835	1840

续表

I 柱温/℃ 化合物	80	100	120	140	160	180	200	220	240	260
2-氯丙酸十四酯	—	—	—		2024	2032	2032	2033	2039	2036
2-氯丙酸十六酯	—	—	—	—	—	2223	2231	2233	2239	2237
2-氯丙酸十八酯	—	—		—	—	—	2427	2431	2439	2440
3-氯丙酸甲酯	838	829	819	783	799	792		—	—	—
3-氯丙酸乙酯	910	902	897	865	880	904	—	—	—	—
3-氯丙酸丙酯	1003	996	996	978	985	986		—	—	—
3-氯丙酸丁酯	1097	1093	1092	1086	1085	1091	1083		—	—
3-氯丙酸戊酯	1192	1190	1189	1188	1188	1192	1185	1162	1201	—
3-氯丙酸己酯	1287	1288	1287	1292	1290	1293	1293	1279	1300	—
3-氯丙酸庚酯	—	1387	1386	1391	1393	1394	1399	1385	1402	—
3-氯丙酸辛酯		—	1486	1491	1494	1495	1494	1487	1502	—
3-氯丙酸壬酯	—	—	1584	1591	1595	1597	1600	1593	1604	1614
3-氯丙酸癸酯	—	—	1681	1691	1696	1700	1701	1700	1708	1712
3-氯丙酸十一酯	—	—	—	1790	1797	1801	1803	1803	1807	1810
3-氯丙酸十二酯	—	—	—		1897	1903	1904	1904	1909	1910
3-氯丙酸十四酯	—	—	—	—	2096	2105	2104	2106	2113	2110
3-氯丙酸十六酯	—	—	—	—	—	2305	2302	2298	2312	2311
3-氯丙酸十八酯	—	—	—	—	—	—	2499	2504	2511	2516

表 17-42 丙酸酯与氯代丙酸酯保留指数（二）[37]

固定液：OV-351

I 柱温/℃ 化合物	80	100	120	140	160	180	200	220
丙酸甲酯	909	937	1003	—	—		—	—
丙酸乙酯	957	977	1031	—	—	—	—	—
丙酸丙酯	1039	1065	1064	—	—	—		—
丙酸丁酯	1139	1159	1145	1178	—	—		—
丙酸戊酯	1238	1255	1234	1258	1288	1210	—	—
丙酸己酯	1339	1353	1330	1362	1378	1358	1412	—
丙酸庚酯	1438	1445	1427	1460	1467	1444	1461	—
丙酸辛酯	1539	1539	1522	1557	1555	1550	1556	—
丙酸壬酯	1637	1634	1618	1657	1659	1652	1664	1680
丙酸癸酯	—	1732	1716	1755	1757	1753	1764	1783
丙酸十一酯	—	1831	1813	1853	1854	1853	1861	1886
丙酸十二酯		1930	1911	1953	1953	1959	1960	1979
丙酸十四酯		—	—	2153	2154	2165	2165	2177
丙酸十六酯	—	—	—	2350	2352	2367	2370	2375
丙酸十八酯	—	—	—	—	2550	2570	2574	2577
2-氯丙酸甲酯	1202	1221	1202	1236	1261	1260	—	—
2-氯丙酸乙酯	1232	1250	1229	1254	1288	1290	—	—
2-氯丙酸丙酯	1312	1327	1305	1340	1359	1361	—	—
2-氯丙酸丁酯	1404	1412	1396	1428	1437	1440	1432	—
2-氯丙酸戊酯	1500	1502	1487	1521	1526	1529	1527	—
2-氯丙酸己酯	1596	1591	1580	1618	1625	1623	1649	1672
2-氯丙酸庚酯	1692	1689	1675	1717	1718	1715	1742	1759
2-氯丙酸辛酯	—	1787	1772	1814	1817	1820	1837	1858
2-氯丙酸壬酯		1885	1869	1913	1914	1922	1934	1967

续表

I 柱温/℃ 化合物	80	100	120	140	160	180	200	220
2-氯丙酸癸酯	—	1981	1966	2013	2014	2022	2030	2037
2-氯丙酸十一酯	—	—	2064	2112	2115	2126	2133	2145
2-氯丙酸十二酯	—	—		2211	2214	2226	2234	2248
2-氯丙酸十四酯		—	—	2409	2414	2427	2436	2450
2-氯丙酸十六酯	—	—	—	—	2612	2627	2640	2650
2-氯丙酸十八酯	—	—	—	—	—	2824	2842	2852
3-氯丙酸甲酯	1339	1353	1330	1362	1378	1358	—	—
3-氯丙酸乙酯	1378	1388	—	1400	1407	1397	1412	—
3-氯丙酸丙酯	1464	1469	1450	1488	1497	1489	1470	
3-氯丙酸丁酯	1558	1558	1542	1580	1582	1586	1605	1638
3-氯丙酸戊酯	1654	1651	1636	1676	1679	1680	1701	1739
3-氯丙酸己酯		1749	1732	1773	1777	1777	1794	1812
3-氯丙酸庚酯	—	1848	1828	1871	1874	1883	1895	1912
3-氯丙酸辛酯	—	1949	1926	1970	1973	1982	1993	2012
3-氯丙酸壬酯	—	—	2023	2070	2073	2084	2093	2104
3-氯丙酸癸酯	—	—	—	2170	2174	2186	2194	2204
3-氯丙酸十一酯	—	—	—	2269	2274	2286	2297	2308
3-氯丙酸十二酯	—	—	—	2368	2374	2387	2397	2381
3-氯丙酸十四酯	—	—	—	—	2572	2587	2602	2613
3-氯丙酸十六酯	—	—	—	—	—	2786	2804	2814
3-氯丙酸十八酯		—	—	—	—	2983	3006	3015

表 17-43 氯代丙酸甲酯保留指数[30]

固定液：OV-101 柱温：120℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
丙酸甲酯	629	3,3-二氯丙酸甲酯	914	2,2,3-三氯丙酸甲酯	1031
2-氯丙酸甲酯	781	2,3-二氯丙酸甲酯	927	2,3,3,3-四氯丙酸甲酯	1137
3-氯丙酸甲酯	833	3,3,3-三氯丙酸甲酯	1015	2,2,3,3-四氯丙酸甲酯	1156
2,2-二氯丙酸甲酯	859	2,3,3-三氯丙酸甲酯	1031	五氯丙酸甲酯	1275

表 17-44 氯代脂肪酸甲酯保留指数（一）[28]

固定液：OV-101

I 柱温/℃ 化合物	80	100	120	I 柱温/℃ 化合物	80	100	120
丙酸甲酯	618	627	629	丁酸甲酯	717	710	709
2-氯丙酸甲酯	768	780	781	2-氯丁酸甲酯	863	861	859
3-氯丙酸甲酯	824	831	833	3-氯丁酸甲酯	869	864	859
2,2-二氯丙酸甲酯	848	854	859	4-氯丁酸甲酯	937	933	927
3,3-二氯丙酸甲酯	914	914	914	2,2-二氯丁酸甲酯	958	957	949
2,3-二氯丙酸甲酯	925	927	927	3,3-二氯丁酸甲酯	960	958	949
3,3,3-三氯丙酸甲酯	1017	1018	1015	赤-2,3-二氯丁酸甲酯	978	978	971
2,3,3-三氯丙酸甲酯	1027	1029	1031	苏-2,3-二氯丁酸甲酯	1011	1009	1001
2,2,3-三氯丙酸甲酯	1028	1030	1031	4,4-二氯丁酸甲酯	1047	1045	1037
2,3,3,3-四氯丙酸甲酯	1131	1137	1137	3,4-二氯丁酸甲酯	1054	1055	1046
2,2,3,3-四氯丙酸甲酯	1149	1157	1156	2,4-二氯丁酸甲酯	1057	1056	1047
五氯丙酸甲酯	1260	1271	1275				

表 17-45　氯代脂肪酸甲酯保留指数（I）[20]

固定液	SE 30					Carbowax 20M				
化合物 \ I \ 柱温/°C	100	120	140	180	200	100	120	140	180	200
戊酸甲酯	802	654	—		—	971	999	—	—	
2-氯戊酸甲酯	949	810	—		—	1333	1366	—	—	
3-氯戊酸甲酯	966	843	—	—	—	1397	1431			—
4-氯戊酸甲酯	983	888	—		—	1431	1475	—	—	—
5-氯戊酸甲酯	1045	995	—	—	—	1556	1597	—	—	—
己酸甲酯	904	818	—	—	—	1086	1108			—
2-氯己酸甲酯	1047	988	—	—	—	1436	1470	—	—	—
3-氯己酸甲酯	1055	1004	—	—	—	1478	1515	—	—	
4-氯己酸甲酯	1083	1048	—	—	—	1526	1570		—	—
5-氯己酸甲酯	1095	1065	—	—	—	1571	1615	—	—	—
6-氯己酸甲酯	1152	1139	—	—	—	1659	1702	—	—	—
庚酸甲酯	1005	962	—	—		1241	1233	—	—	—
2-氯庚酸甲酯	1147	1120	—	—		1535	1578	—	—	—
3-氯庚酸甲酯	1154	1139	—		—	1573	1618		—	—
4-氯庚酸甲酯	1176	1166	—	—	—	1604	1650	—	—	—
5-氯庚酸甲酯	1196	1191	—	—		1657	1702	—	—	—
6-氯庚酸甲酯	1205	1201	—	—		1677	1723	—	—	—
7-氯庚酸甲酯	1257	1260	—	—	—	1756	1799			—
辛酸甲酯	1105	1082	—	—	—	1373	1394			—
2-氯辛酸甲酯	1248	1251	—	—	—	1635	1676	—	—	—
3-氯辛酸甲酯	1252	1255	—		—	1668	1708	—	—	
4-氯辛酸甲酯	1273	1279	—	—	—	1697	1743	—	—	
5-氯辛酸甲酯	1284	1291	—	—	—	1731	1774	—		—
6-氯辛酸甲酯	1302	1311	—	—	—	1762	1805	—	—	—
7-氯辛酸甲酯	1308	1316	—		—	1775	1818	—	—	—
8-氯辛酸甲酯	1358	1369	—	—	—	1851	1893	—	—	—
壬酸甲酯	1206	1202	1206	—	—	1481	1514	1476		—
2-氯壬酸甲酯	1347	1357	1351	—		1733	1773	1724	—	—
3-氯壬酸甲酯	1351	1362	1354	—	—	1765	1805	1755	—	—
4-氯壬酸甲酯	1371	1382	1376	—	—	1790	1831	1786	—	
5-氯壬酸甲酯	1380	1393	1385	—	—	1822	1862	1817	—	—
6-氯壬酸甲酯	1391	1403	1396	—	—	1837	1877	1834	—	—
7-氯壬酸甲酯	1405	1418	1411	—	—	1860	1900	1859	—	—
8-氯壬酸甲酯	1408	1421	1414	—	—	1873	1912	1872	—	—
9-氯壬酸甲酯	1459	1472	1465	—	—	1947	1985	1946	—	—
癸酸甲酯	—	1312	1306	—	—	—	1624	1570	—	—
2-氯癸酸甲酯	—	1459	1451	—	—	—	1869	1820	—	—
3-氯癸酸甲酯	—	1463	1455	—	—	—	1900	1853	—	
4-氯癸酸甲酯	—	1483	1476	—		—	1926	1884	—	—
5-氯癸酸甲酯	—	1491	1484		—	—	1954	1912		—
6-氯癸酸甲酯	—	1500	1493	—	—	—	1968	1927		—
7-氯癸酸甲酯	—	1506	1500	—	—	—	1976	1936	—	—
8-氯癸酸甲酯	—	1520	1514	—	—	—	1998	1959	—	—
9-氯癸酸甲酯	—	1522	1516	—	—	—	2009	1971	—	—
10-氯癸酸甲酯	—	1573	1567	—		—	2079	2044	—	—
十　酸甲酯		—	1407	—	—	—	—	1672	—	—

续表

固定液	SE-30					Carbowax 20M				
I 柱温/℃ 化合物	100	120	140	180	200	100	120	140	180	200
2-氯十一酸甲酯	—	—	1551	—	—	—	—	1917	—	—
3-氯十一酸甲酯	—	—	1555	—	—	—	—	1949	—	—
4-氯十一酸甲酯	—	—	1576	—	—	—	—	1978	—	—
5-氯十一酸甲酯	—	—	1583	—	—	—	—	2006	—	—
6-氯十一酸甲酯	—	—	1591	—	—	—	—	2017	—	—
7-氯十一酸甲酯	—	—	1597	—	—	—	—	2025	—	—
8-氯十一酸甲酯	—	—	1602	—	—	—	—	2033	—	—
9-氯十一酸甲酯	—	—	1615	—	—	—	—	2055	—	—
10-氯十一酸甲酯	—	—	1616	—	—	—	—	2066	—	—
11-氯十一酸甲酯	—	—	1668	—	—	—	—	2139	—	—
十二酸甲酯	—	—	1508	—	—	—	—	1770	—	—
2-氯十二酸甲酯	—	—	1652	—	—	—	—	2013	—	—
3-氯十二酸甲酯	—	—	1656	—	—	—	—	2045	—	—
4-氯十二酸甲酯	—	—	1677	—	—	—	—	2074	—	—
5-氯十二酸甲酯	—	—	1683	—	—	—	—	2100	—	—
6-氯十二酸甲酯	—	—	1691	—	—	—	—	2113	—	—
7-氯十二酸甲酯	—	—	1696	—	—	—	—	2117	—	—
8-氯十二酸甲酯	—	—	1700	—	—	—	—	2123	—	—
9-氯十二酸甲酯	—	—	1704	—	—	—	—	2130	—	—
10-氯十二酸甲酯	—	—	1718	—	—	—	—	2152	—	—
11-氯十二酸甲酯	—	—	1718	—	—	—	—	2162	—	—
12-氯十二酸甲酯	—	—	1769	—	—	—	—	2231	—	—
十三酸甲酯	—	—	1607	—	—	—	—	1866	—	—
2-氯十三酸甲酯	—	—	1752	—	—	—	—	2110	—	—
3-氯十三酸甲酯	—	—	1755	—	—	—	—	2142	—	—
4-氯十三酸甲酯	—	—	1776	—	—	—	—	2172	—	—
5-氯十三酸甲酯	—	—	1783	—	—	—	—	2197	—	—
6-氯十三酸甲酯	—	—	1791	—	—	—	—	2211	—	—
7-氯十三酸甲酯	—	—	1794	—	—	—	—	2214	—	—
8-氯十三酸甲酯	—	—	1796	—	—	—	—	2218	—	—
9-氯十三酸甲酯	—	—	1800	—	—	—	—	2222	—	—
10-氯十三酸甲酯	—	—	1804	—	—	—	—	2229	—	—
11-氯十三酸甲酯	—	—	1817	—	—	—	—	2249	—	—
12-氯十三酸甲酯	—	—	1818	—	—	—	—	2260	—	—
13-氯十三酸甲酯	—	—	1868	—	—	—	—	2330	—	—
十四酸甲酯	—	—	—	1712	—	—	—	—	1990	—
2-氯十四酸甲酯	—	—	—	1859	—	—	—	—	2246	—
3-氯十四酸甲酯	—	—	—	1863	—	—	—	—	2279	—
4-氯十四酸甲酯	—	—	—	1884	—	—	—	—	2313	—
5-氯十四酸甲酯	—	—	—	1892	—	—	—	—	2339	—
6-氯十四酸甲酯	—	—	—	1899	—	—	—	—	2353	—
7-氯十四酸甲酯	—	—	—	1904	—	—	—	—	2356	—
8-氯十四酸甲酯	—	—	—	1905	—	—	—	—	2358	—
9-氯十四酸甲酯	—	—	—	1907	—	—	—	—	2359	—
10-氯十四酸甲酯	—	—	—	1910	—	—	—	—	2365	—
11-氯十四酸甲酯	—	—	—	1915	—	—	—	—	2372	—

续表

固定液	SE-30					Carbowax 20M				
I 柱温/℃ 化合物	100	120	140	180	200	100	120	140	180	200
12-氯十四酸甲酯	—	—		1929	—	—	—	—	2356	—
13-氯十四酸甲酯	—	—	—	1929	—	—	—		2406	—
14-氯十四酸甲酯	—	—	—	1981	—	—	—	—	2486	—
十五酸甲酯	—	—	—	1806	—	—	—	—	2090	—
2-氯十五酸甲酯	—	—	—	1957	—	—	—	—	2349	—
3-氯十五酸甲酯	—	—	—	1961	—	—	—	—	2385	—
4-氯十五酸甲酯	—	—	—	1983	—	—	—	—	2419	—
5-氯十五酸甲酯	—	—	—	1990	—	—	—	—	2448	—
6-氯十五酸甲酯	—	—	—	1998	—	—	—	—	2462	—
7-氯十五酸甲酯	—	—	—	2002	—	—	—	—	2465	—
8-氯十五酸甲酯	—	—	—	2002	—	—	—	—	2468	—
9-氯十五酸甲酯		—	—	2005	—	—	—	—	2471	—
10-氯十五酸甲酯	—	—	—	2005	—	—	—	—	2473	—
11-氯十五酸甲酯	—	—	—	2009	—	—	—	—	2478	—
12-氯十五酸甲酯	—	—	—	2013	—	—	—	—	2484	—
13-氯十五酸甲酯	—	—	—	2027	—	—	—	—	2506	—
14-氯十五酸甲酯	—	—	—	2028	—	—	—	—	2517	—
15-氯十五酸甲酯	—	—	—	2079	—		—	—	2592	—
十六酸甲酯	—	—	—	1902	1902	—	—	—	2191	2202
2-氯十六酸甲酯	—	—	—	2056	2057	—	—	—	2455	2452
3-氯十六酸甲酯	—	—	—	2060	2062	—	—	—	2490	2485
4-氯十六酸甲酯	—	—	—	2083	2083	—	—	—	2522	2520
5-氯十六酸甲酯	—	—	—	2089	2090	—	—	—	2547	2544
6-氯十六酸甲酯		—	—	2097	2097	—	—	—	2560	2557
7-氯十六酸甲酯	—	—	—	2100	2099	—	—	—	2562	2559
8-氯十六酸甲酯	—	—	—	2101	2101	—	—		2565	2561
9-氯十六酸甲酯	—	—	—	2103	2102	—	—	—	2567	2562
10-氯十六酸甲酯	—	—	—	2104	2103	—	—	—	2570	2564
11-氯十六酸甲酯	—	—	—	2105	2105	—	—	—	2572	2566
12-氯十六酸甲酯	—		—	2109	2108	—	—	—	2578	2573
13-氯十六酸甲酯	—	—	—	2113	2113	—	—	—	2584	2579
14-氯十六酸甲酯	—	—	—	2127	2127	—	—	—	2608	2603
15-氯十六酸甲酯	—	—	—	2127	2127	—	—	—	2619	2613
16-氯十六酸甲酯	—	—	—	2181	2178	—	—	—	2696	2691
十七酸甲酯	—	—	—	2011	2007	—	—	—	2295	2297
2-氯十七酸甲酯	—	—	—	2163	2157	—	—	—	2557	2548
3-氯十七酸甲酯	—	—	—	2169	2161	—	—	—	2592	2579
4-氯十七酸甲酯	—	—	—	2192	2183	—	—		2628	2614
5-氯十七酸甲酯	—		—	2198	2190	—	—	—	2651	2639
6-氯十七酸甲酯	—	—	—	2210	2198	—	—	—	2662	2652
7-氯十七酸甲酯	—	—	—	2214	2201	—	—	—	2664	2653
8-氯十七酸甲酯	—	—	—	2215	2202	—		—	2667	2655
9-氯十七酸甲酯	—	—	—	2217	2203	—	—	—	2669	2656
10-氯十七酸甲酯	—	—	—	2218	2204	—	—	—	2672	2657
11-氯十七酸甲酯	—	—	—	2220	2205	—	—	—	2675	2661
12-氯十七酸甲酯	—	—	—	2221	2206	—	—	—	2677	2662

续表

固定液	SE-30					Carbowax 20M				
I 柱温/℃ 化合物	100	120	140	180	200	100	120	140	180	200
13-氯十七酸甲酯	—	—	—	2222	2210	—	—	—	2685	2668
14-氯十七酸甲酯	—		—	2226	2214		—	—	2692	2675
15-氯十七酸甲酯	—	—		2240	2227	—	—	—	2713	2698
16-氯十七酸甲酯		—	—	2240	2228	—	—	—	2725	2709
17-氯十七酸甲酯		—	—	2289	2277	—	—	—	2800	2787
十八酸甲酯	—		—	2114	2102	—	—	—	2396	2389
2-氯十八酸甲酯	—	—	—	2265	2254	—	—	—	2657	2642
3-氯十八酸甲酯	—	—	—	2269	2259	—	—	—	2691	2675
4-氯十八酸甲酯	—		—	2291	2282	—	—	—	2724	2711
5-氯十八酸甲酯	—	—	—	2298	2289	—	—	—	2753	2737
6-氯十八酸甲酯	—	—	—	2309	2305		—	—	2761	2743
7-氯十八酸甲酯			—	2312	2308	—	—	—	2763	2746
8-氯十八酸甲酯	—	—	—	2313	2310		—	—	2765	2750
9-氯十八酸甲酯	—	—	—	2314	2313	—	—	—	2767	2753
10-氯十八酸甲酯	—	—	—	2315	2314	—	—	—	2769	2756
11-氯十八酸甲酯	—	—	—	2317	2317	—	—	—	2771	2759
12-氯十八酸甲酯	—	—	—	2317	2318	—	—	—	2773	2762
13-氯十八酸甲酯	—	—	—	2319	2320	—	—	—	2775	2765
14-氯十八酸甲酯	—			2320	2322	—	—	—	2780	2770
15-氯十八酸甲酯	—	—	—	2324	2325	—	—	—	2787	2777
16-氯十八酸甲酯	—		—	2338	2337	—	—	—	2809	2799
17-氯十八酸甲酯	—	—	—	2338	2338	—	—	—	2821	2810
18-氯十八酸甲酯	—	—	—	2388	2381		—	—	2897	2884

表 17-46　丁酸酯与氯代丁酸酯的保留指数 (一)[43]

固定液：SE-30

I 柱温/℃ 化合物	60	80	100	120	140	160	180
丁酸甲基乙酯	836	826	821	814	831	—	—
丁酸二甲基乙酯	873	866	858	851	873	—	—
丁酸-1-甲基丙酯	930	923	915	906	943	—	—
丁酸-1,1-二甲基丙酯	977	972	963	955	977	—	—
丁酸-2-甲基丙酯	946	940	930	933	956	—	—
丁酸-1,2-二甲基丙酯	1000	993	985	978	1000	—	—
丁酸-1-甲基丁酯	1016	1010	999	992	1012	—	—
丁酸-3-甲基丁酯	1045	1039	1029	1021	1043	—	—
丁酸-2-丙烯酯	—	—	884	851	868	894	918
丁酸-1-甲基-3-丁烯酯	—		1007	978	997	1006	1027
丁酸-3-丁烯酯	—	—	971	941	961	972	996
丁酸-4-戊烯酯	—	—	1070	1045	1064	1070	1088
丁酸-2-丙炔酯	—	—	895	857	873	894	918
丁酸-反-3-己烯酯	—	—	1169	1148	1166	1171	1179
丁酸-顺-3-己烯酯	—	—	1170	1150	1170	1174	1182
2-氯丁酸甲基乙酯	973	967	959	952	977	—	—
2-氯丁酸二甲基乙酯	1008	1003	997	992	1012	—	—

续表

化合物 \ I \ 柱温/°C	60	80	100	120	140	160	180
2-氯丁酸-1-甲基丙酯	1065	1062	1054	1050	1074	—	—
2-氯丁酸-1,1-二甲基丙酯	1110	1107	1103	1100	1126	—	—
2-氯丁酸-2-甲基丙酯	1080	1076	1069	1065	1089	—	—
2-氯丁酸-1,2-二甲基丙酯	1133	1129	1124	1120	1143	—	—
2-氯丁酸-1-甲基丁酯	1149	1145	1138	1133	1158		—
2-氯丁酸-3-甲基丁酯	1177	1173	1168	1165	1189	—	—
2-氯丁酸-2-丙烯酯	—	—	1020	994	1016	1028	1048
2-氯丁酸-1-甲基-3-丁烯酯		—	1140	1121	1143	1150	1162
2-氯丁酸-3-丁烯酯	—	—	1109	1088	1109	1115	1129
2-氯丁酸-4-戊烯酯	—	—	1204	1189	1211	1218	1227
2-氯丁酸-2-丙炔酯	—	—	1032	1007	1027	1037	1062
2-氯丁酸-反-3-己烯酯	—	—	1305	1294	1315	1320	1326
2-氯丁酸-顺-3-己烯酯	—	—	1308	1297	1319	1323	1330
3-氯丁酸甲基乙酯	988	982	974	968	990	—	—
3-氯丁酸二甲基乙酯	1027	1023	1015	1009	1034	—	—
3-氯丁酸-1-甲基丙酯	1082	1077	1070	1065	1089	—	—
3-氯丁酸-1,1-二甲基丙酯	1130	1127	1122	1119	1143		—
3-氯丁酸-2-甲基丙酯	1097	1092	1085	1081	1105	—	—
3-氯丁酸-1,2-二甲基丙酯	1150	1146	1141	1137	1161		—
3-氯丁酸-1-甲基丁酯	1167	1162	1156	1151	1174	—	
3-氯丁酸-3-甲基丁酯	1193	1189	1184	1181	1204	—	—
3-氯丁酸-2-丙烯基酯	—	—	1032	1007	1027	1037	1962
3-氯丁酸-1-甲基-3-丁烯酯	—	—	1 56	1138	1160	1167	1177
3-氯丁酸-3-丁烯酯	—	—	1121	1101	1122	1131	1144
3-氯丁酸-4-戊烯酯	—	—	1220	1205	1227	1232	1243
3-氯丁酸-2-丙炔酯	—	—	1020	1017	1035	1045	1062
3-氯丁酸-反-3-己烯酯	—	—	1318	1307	1328	1332	1339
3-氯丁酸-顺-3-己烯酯	—	—	1321	1311	1332	1336	1344
4-氯丁酸甲基乙酯	1053	1048	1039	1033	1055	—	—
4-氯丁酸二甲基乙酯	1090	1085	1078	1074	1097	—	—
4-氯丁酸-1-甲基丙酯	1145	1140	1134	1130	1154	—	—
4-氯丁酸-1,1-二甲基丙酯	1191	1188	1184	1180	1207	—	—
4-氯丁酸-2-甲基丙酯	1163	1158	1153	1148	1173	—	—
4-氯丁酸-1,2-二甲基丙酯	1212	1208	1204	1201	1227	—	—
4-氯丁酸-1-甲基丁酯	1229	1224	1220	1216	1240	—	—
4-氯丁酸-3-甲基丁酯	1260	1256	1253	1251	1274	—	—
4-氯丁酸-2-丙烯酯	—	—	1097	1077	1097	1105	1121
4-氯丁酸-1-甲基-3-丁烯酯	—	—	1220	1203	1227	1232	1243
4-氯丁酸-3-丁烯酯	—	—	1187	1171	1193	1200	1210
4-氯丁酸-4-戊烯酯	—		1326	1277	1298	1303	1311
4-氯丁酸-2-丙炔酯	—	—	1111	1089	1109	1115	1130
4-氯丁酸-反-3-己烯酯	—	—	1385	1377	1397	1402	1409
4-氯丁酸-顺-3-己烯酯	—	—	1389	1382	1402	1407	1415

表 17-47　丁酸酯与氯代丁酸酯的保留指数（二）[38]

固定液：OV-351

I / 柱温/℃ 化合物	80	100	120	140	160	180	200	220
丁酸甲酯	981	989	1036			—	—	—
丁酸乙酯	1030	1048	1085	—	—	—	—	—
丁酸丙酯	1114	1146	1169	1227	1233	—	—	
丁酸丁酯	1209	1237	1262	1294	1300	1272	—	—
丁酸戊酯	1305	1333	1352	1375	1382	1382	—	—
丁酸己酯	1403	1425	1441	1460	1467	1456	—	—
丁酸庚酯	1500	1516	1525	1547	1550	1550	1540	—
丁酸辛酯	1599	1609	1614	1642	1645	1643	1656	—
丁酸壬酯	1696	1704	1702	1738	1740	1740	1784	—
丁酸癸酯	—	1800	1790	1835	1838	1843	1884	—
丁酸十一酯	—	—	1881	1933	1936	1943	1894	1903
丁酸十二酯	—	—	1973	2032	2035	2042	2004	2002
丁酸十四酯	—		—	2229	2234	2241	2215	2216
丁酸十六酯	—	—	—	2426	2432	2440	2425	2423
丁酸十八酯	—	—	—	—	2629	2636	2628	2629
2-氯丁酸甲酯	1263	1292	1317	1345	1354	1341	—	—
2-氯丁酸乙酯	1294	1322	1344	1368	1382	1382	—	—
2-氯丁酸丙酯	1371	1396	1414	1439	1441	1425	—	—
2-氯丁酸丁酯	1460	1479	1495	1520	1524	1519	—	—
2-氯丁酸戊酯	1552	1565	1576	1603	1611	1611	—	—
2-氯丁酸己酯	1647	1666	1661	1695	1703	1706	1634	1620
2-氯丁酸庚酯	—	1750	1748	1791	1798	1802	1746	1746
2-氯丁酸辛酯	—	1844	1837	1888	1896	1904	1853	1853
2-氯丁酸壬酯	—	—	1927	1986	1993	2004	1960	1969
2-氯丁酸癸酯	—		2020	2084	2093	2106	2071	2072
2-氯丁酸十一酯	—	—	2112	2183	2190	2203	2177	2183
2-氯丁酸十二酯	—	—	—	2281	2291	2301	2285	2286
2-氯丁酸十四酯	—	—	—	—	2489	2500	2493	2493
2-氯丁酸十六酯	—	—	—	—	2687	2699	2698	2703
2-氯丁酸十八酯	—	—	—	—	—	2894	2903	2906
3-氯丁酸甲酯	1305	1333	1352	1375	1382	1382	—	—
3-氯丁酸乙酯	1343	1370	1390	1413	1419	1411		—
3-氯丁酸丙酯	1428	1450	1466	1489	1497	1478	—	—
3-氯丁酸丁酯	1518	1553	1546	1570	1574	1574	1527	—
3-氯丁酸戊酯	1613	1623	1630	1660	1667	1672	1600	1569
3-氯丁酸己酯	—	1716	1716	1756	1763	1769	1705	1711
3-氯丁酸庚酯	—	1810	1804	1852	1858	1865	1813	1812
3-氯丁酸辛酯	—	—	1895	1950	1955	1965	1926	1924
3-氯丁酸壬酯	—	—	1986	2047	2054	2066	2030	2033
3-氯丁酸癸酯	—	—	2078	2147	2154	2165	2137	2134
3-氯丁酸十一酯	—	—	—	2245	2252	2264	2243	2246
3-氯丁酸十二酯	—	—	—	2343	2352	2364	2348	2347
3-氯丁酸十四酯	—	—		—	2550	2562	2554	2552
3-氯丁酸十六酯	—	—	—	—	—	2760	2757	2765
3-氯丁酸十八酯	—	—	—	—	—	—	2959	2966
4-氯丁酸甲酯	1421	1445	1462	1489	1497	1478	—	—
4-氯丁酸乙酯	1460	1479	1495	1520	1524	1519	—	—

续表

I　　柱温/℃ 化合物	80	100	120	140	160	180	200	220
4-氯丁酸丙酯	1541	1555	1568	1599	1607	1611		—
4-氯丁酸丁酯	1634	1646	1652	1690	1699	1706	1634	1620
4-氯丁酸戊酯	—	1744	1738	1784	1794	1802	1715	1746
4-氯丁酸己酯		1842	1827	1880	1889	1900	1853	1853
4-氯丁酸庚酯	—	—	1917	1978	1985	2000	1960	1969
4-氯丁酸辛酯	—	—	2009	2075	2086	2098	2071	2072
4-氯丁酸壬酯	—	—	2101	2174	2185	2200	2177	2183
4-氯丁酸癸酯	—	—	-	2272	2285	2298	2284	2286
4-氯丁酸十一酯	—	—	—	2371	2385	2397	2387	2391
4-氯丁酸十二酯		—	—	—	2484	2497	2492	2493
4-氯丁酸十四酯	—	—	—	—	2682	2696	2696	2702
4-氯丁酸十六酯	—	—	-			2892	2901	2905
4-氯丁酸十八酯			—	—	—	—	3100	3107

表 17-48　丁酸酯与氯代丁酸酯的保留指数（三）[39]

固定液：SE 30

I　　柱温/℃ 化合物	80	100	120	140	160	180	200	220	240
丁酸甲酯	710	723	706	663	681	—	—	—	—
丁酸乙酯	792	802	783	757	747	689	—	—	—
丁酸丙酯	888	896	885	863	845	835		-	—
丁酸丁酯	985	991	982	964	957	937	951	897	—
丁酸戊酯	1083	1088	1084	1067	1058	1048	1056	1020	-
丁酸己酯	1182	1187	1185	1166	1160	1152	1157	1125	1111
丁酸庚酯	1279	1287	1286	1267	1260	1251	1258	1243	1231
丁酸辛酯		1387	1388	1367	1362	1359	1351	1347	1345
丁酸壬酯			1489	1466	1464	1461	1453	1452	1445
丁酸癸酯	-		1590	1566	1564	1565	1565	1557	1548
丁酸十一酯	—	—	—	1665	1661	1666	1666	1660	1653
丁酸十二酯	—	—	—	1763	1765	1767	1768	1761	1754
丁酸十四酯				1959	1965	1969	1967	1961	1961
丁酸十六酯						2169	2165	2165	2164
丁酸十八酯	—	—	—	—	—	—	2362	2363	2365
2-氯丁酸甲酯	867	875	865	845	815	835	--	-	
2-氯丁酸乙酯	937	945	936	911	904	923	922	—	-
2-氯丁酸丙酯	1029	1037	1032	1018	1014	1007	1010	-	--
2-氯丁酸丁酯	1124	1131	1131	1117	1112	1105	1115	1070	1084
2-氯丁酸戊酯	1220	1228	1228	1215	1211	1209	1216	1172	1188
2-氯丁酸己酯	1315	1327	1330	1311	1313	1309	1318	1305	1306
2-氯丁酸庚酯	—	1427	1431	1413	1412	1410	1419	1409	1402
2-氯丁酸辛酯	—	—	1530	1512	1513	1516	1522	1513	1505
2-氯丁酸壬酯	—	—	1631	1611	1613	1618	1622	1616	1613
2-氯丁酸癸酯	—	—	—	1709	1713	1718	1722	1719	1716
2-氯丁酸十一酯	—	—	—	1807	1813	1820	1823	1822	1818
2-氯丁酸十二酯	—	—	—	1905	1913	1920	1922	1922	1922
2-氯丁酸十四酯	—	—	—			2120	2120	2123	2127
2-氯丁酸十八酯			-	—	—	—	2317	2322	2324
2-氯丁酸十八酯	—	—	—	—				2519	2521

续表

化合物 \ 柱温/℃ I	80	100	120	140	160	180	200	220	240
3-氯丁酸甲酯	873	881	870	848	845	835	—	—	—
3-氯丁酸乙酯	948	955	947	935	926	923	922	848	—
3-氯丁酸丙酯	1043	1050	1045	1030	1026	1014	1016	987	—
3-氯丁酸丁酯	1139	1145	1145	1130	1126	1117	1133	1102	1084
3-氯丁酸戊酯	1235	1244	1244	1230	1227	1223	1229	1196	1202
3-氯丁酸己酯	1331	1343	1346	1330	1328	1325	1334	1315	1320
3-氯丁酸庚酯	—	1443	1446	1429	1428	1428	1436	1425	1417
3-氯丁酸辛酯	—	—	1547	1528	1529	1531	1538	1531	1521
3-氯丁酸壬酯	—	—	—	1627	1629	1633	1638	1634	1628
3-氯丁酸癸酯		—	—	1725	1729	1734	1738	1736	1732
3-氯丁酸十一酯		—	—	1823	1829	1836	1839	1838	1834
3-氯丁酸十二酯	—	—		1921	1929	1936	1939	1938	1938
3-氯丁酸十四酯	—	—	—		—	2137	2137	2139	2142
3-氯丁酸十六酯	—	—	—	—		—	2333	2338	2342
3-氯丁酸十八酯	—	—		—	—	—	—	2535	2541
4-氯丁酸甲酯	941	990	941	924	920	923	922	848	—
4-氯丁酸乙酯	1015	1022	1018	1002	995	989	982	930	
4-氯丁酸丙酯	1110	1117	1117	1102	1100	1093	1099	1042	1084
4-氯丁酸丁酯	1208	1215	1216	1202	1199	1194	1202	1162	1174
4-氯丁酸戊酯	1303	1314	1317	1301	1299	1295	1308	1286	1294
4-氯丁酸己酯		1417	1418	1401	1401	1401	1409	1397	1390
4-氯丁酸庚酯	—		1518	1500	1501	1503	1510	1499	1493
4-氯丁酸辛酯	—	—	1619	1599	1601	1607	1611	1605	1605
4-氯丁酸壬酯	—	—	—	1698	1702	1708	1711	1710	1708
4-氯丁酸癸酯		—	—	1796	1802	1809	1812	1811	1809
4-氯丁酸十一酯	—		—	1894	1902	1909	1912	1913	1911
4-氯丁酸十二酯	—	—	—	1991	2001	2010	2012	2014	2016
4-氯丁酸十四酯	—		—	—	—	2211	2210	2214	2218
4-氯丁酸十六酯		—	—	—	—	—	2406	2412	2417
4-氯丁酸十八酯	—	—	—	—	—	—		2608	2616

表 17-49 丁酸酯与氯代丁酸酯的保留指数（四）[48]

固定液：OV-351

化合物 \ 柱温/℃ I	60	80	100	120	140	160	180
丁酸甲基乙酯	1060	1058	1090	1145	1241	—	—
丁酸二甲基乙酯	1060	1058	1090	1145	1241	—	—
丁酸-1-甲基丙酯	1144	1138	1159	1200	1286	—	—
丁酸-1,1-二甲基丙酯	1163	1157	1178	1215	1304	—	—
丁酸-2-甲基丙酯	1171	1165	1185	1221	1304	—	—
丁酸-1,2-二甲基丙酯	1200	1193	1209	1243	1318	—	—
丁酸-1-甲基丁酯	1223	1215	230	1260	1334	—	—
丁酸-3-甲基丁酯	1270	1264	1278	1303	1373	—	—
丁酸-2-丙烯酯	—	—	198	1227	1308	1359	1397
丁酸-1-甲基-3-丁烯酯	—	—	1267	1290	1368	1427	1489
丁酸-3-丁烯酯		—	272	1292	1368	1427	1489
丁酸-4-戊烯酯	—	—	1370	1377	1433	1471	1528
丁酸-2-丙炔酯		—	1372	1381	1433	1471	1528

续表

化合物 \ I \ 柱温/℃	60	80	100	120	140	160	180
丁酸-反-3-己烯酯		—	1452	1457	1517	1546	1593
丁酸-顺-3-己烯酯	—	—	1459	1466	1527	1553	1593
2-氯丁酸甲基乙酯	1298	1291	1304	1327	1393		—
2-氯丁酸二甲基乙酯	1292	1287	1299	1327	1393	—	—
2-氯丁酸-1-甲基丙酯	1380	1375	1385	1405	1463	—	—
2-氯丁酸-1,1-二甲基丙酯	1395	1392	1402	1424	1482	—	—
2-氯丁酸-2-甲基丙酯	1406	1403	1413	1431	1488		—
2-氯丁酸-1,2-二甲基丙酯	1427	1424	1434	1454	1507	—	—
2-氯丁酸-1-甲基丁酯	1453	1450	1458	1474	1527	—	—
2-氯丁酸-3-甲基丁酯	1504	1503	1513	1529	1579	—	—
2-氯丁酸-2-丙烯酯	—	—	1443	1450	1514	1546	1593
2-氯丁酸-1-甲基-3-丁烯酯		—	1501	1507	1565	1590	1637
2-氯丁酸-3-丁烯酯	—	—	1520	1525	1582	1607	1652
2-氯丁酸-4-戊烯酯	—		1613	1618	1671	1692	1729
2-氯丁酸-2-丙炔酯	—		1645	1651	1684	1699	1731
2-氯丁酸-反-3-己烯酯	—		1696	1700	1750	1765	1797
2-氯丁酸-顺-3-己烯酯		—	1704	1710	1760	1776	1808
3-氯丁酸甲基乙酯	1353	1347	1356	1376	1435	—	—
3-氯丁酸二甲基乙酯	1349	1344	1352	1376	1435	—	—
3-氯丁酸-1-甲基丙酯	1439	1434	1442	1460	1513	—	—
3-氯丁酸-1,1-二甲基丙酯	1455	1451	1459	1474	1527	—	—
3-氯丁酸-2-甲基丙酯	1468	1464	1472	1488	1538	—	—
3-氯丁酸-1,2-二甲基丙酯	1492	1490	1498	1514	1564	—	—
3-氯丁酸-1-甲基丁酯	1514	1511	1519	1533	1580	—	—
3-氯丁酸-3-甲基丁酯	1564	1565	1572	1586	1632		—
3-氯丁酸-2-丙烯酯	—	—	1496	1501	1558	1586	1637
3-氯丁酸-1-甲基-3-丁酯	—	—	1560	1564	1618	1640	1677
3-氯丁酸-3-丁酯	—		1573	1577	1632	1654	1693
3-氯丁酸-4-戊酯	—	—	1675	1680	1732	1748	1781
3-氯丁酸-2-丙炔酯	—	—	1689	1692	1749	1765	1797
3-氯丁酸-反-3-己烯酯	—	—	1750	1755	1814	1816	1843
3-氯丁酸-顺-3-己烯酯	—	—	1759	1764	1824	1827	1855
4-氯丁酸甲基乙酯	1459	1456	1466	1482	1534	—	—
4-氯丁酸二甲基乙酯	1453	1450	1458	1474	1527	—	—
4-氯丁酸-1-甲基丙酯	1539	1541	1550	1566	1615	—	—
4-氯丁酸-1,1-二甲基丙酯	1552	1556	1565	1583	1632		—
4-氯丁酸-2-甲基丙酯	1572	1575	1584	1601	1650	—	—
4-氯丁酸-1,2-二甲基丙酯	1600	1600	1604	1621	1668	—	—
4-氯丁酸-1-甲基丁酯	1616	1619	1628	1644	1689	—	—
4-氯丁酸-3-甲基丁酯	1673	1680	1690	1706	1749	—	—
4-氯丁酸-2-丙烯酯	—	—	1613	1618	1671	1692	1729
4-氯丁酸-1-甲基-3-丁烯酯	—	—	1671	1678	1730	1748	1781
4-氯丁酸-3-丁烯酯	—	—	1695	1696	1749	1765	1797
4-氯丁酸-4-戊烯酯	—		1792	1800	1851	1865	1892
4-氯丁酸-2-丙炔酯		—	1817	1817	1858	1867	1892
4-氯丁酸-反-3-己烯酯	—		1868	1875	1924	1935	1960
4-氯丁酸-顺-3-己烯酯		—	1880	1888	1939	1950	1976

表 17-50 苯甲酸酯与氯代苯甲酸酯的保留指数[46]

固定液	SE-30			OV-351		
I 柱温/℃ 化合物	160	180	200	160	180	200
苯甲酸甲酯	1097	1100	1101	1643	1657	1700
苯甲酸乙酯	1164	1176	1179	1685	1709	1725
苯甲酸丙酯	1264	1272	1276	1777	1791	1818
苯甲酸丁酯	1360	1367	1373	1879	1884	1913
苯甲酸戊酯	1458	1467	1474	1974	1976	2003
苯甲酸己酯	1558	1566	1573	2075	2081	2107
苯甲酸庚酯	1657	1665	1673	2174	2184	2207
苯甲酸辛酯	1756	1764	1772	2273	2287	2304
苯甲酸壬酯	1856	1864	1873	2374	2385	2406
苯甲酸癸酯	1955	1964	1972	2475	2488	2506
苯甲酸十一酯	2055	2063	2071	2576	2590	2607
苯甲酸十二酯	2155	2163	2172	2677	2691	2709
邻氯苯甲酸甲酯	1258	1265	1278	1937	1936	1970
邻氯苯甲酸乙酯	1327	1334	1342	1971	1971	2007
邻氯苯甲酸丙酯	1422	1432	1437	2055	2058	2095
邻氯苯甲酸丁酯	1520	1529	1540	2144	2153	2184
邻氯苯甲酸戊酯	1617	1627	1637	2240	2249	2283
邻氯苯甲酸己酯	1717	1726	1736	2338	2349	2379
邻氯苯甲酸庚酯	1816	1826	1836	2438	2452	2475
邻氯苯甲酸辛酯	1915	1925	1936	2539	2555	2575
邻氯苯甲酸壬酯	2014	2024	2035	2639	2657	2676
邻氯苯甲酸癸酯	2114	2123	2133	2740	2756	2778
邻氯苯甲酸十一酯	2213	2223	2234	2841	2858	2880
邻氯苯甲酸十二酯	2313	2323	2333	2943	2963	2983
间氯苯甲酸甲酯	1253	1262	1275	1854	1864	1886
间氯苯甲酸乙酯	1323	1331	1340	1887	1893	1909
间氯苯甲酸丙酯	1418	1427	1434	1965	1967	1999
间氯苯甲酸丁酯	1517	1526	1536	2057	2070	2100
间氯苯甲酸戊酯	1614	1624	1632	2153	2166	2195
间氯苯甲酸己酯	1714	1723	1732	2251	2263	2295
间氯苯甲酸庚酯	1812	1822	1831	2354	2365	2392
间氯苯甲酸辛酯	1911	1920	1931	2453	2466	2489
间氯苯甲酸壬酯	2010	2019	2029	2553	2569	2590
间氯苯甲酸癸酯	2109	2118	2128	2653	2669	2689
间氯苯甲酸十一酯	2208	2218	2228	2753	2768	2792
间氯苯甲酸十二酯	2308	2317	2327	2854	2870	2893
对氯苯甲酸甲酯	1254	1262	1275	1849	1859	1891
对氯苯甲酸乙酯	1324	1331	1340	1885	1893	1917
对氯苯甲酸丙酯	1419	1428	1434	1970	1974	2001
对氯苯甲酸丁酯	1518	1528	1539	2065	2073	2102
对氯苯甲酸戊酯	1616	1626	1635	2158	2170	2198
对氯苯甲酸己酯	1716	1726	1735	2254	2268	2297
对氯苯甲酸庚酯	1815	1825	1835	2356	2369	2394
对氯苯甲酸辛酯	1914	1924	1935	2456	2470	2493
对氯苯甲酸壬酯	2013	2023	2035	2555	2572	2594
对氯苯甲酸癸酯	2113	2122	2133	2656	2672	2694
对氯苯甲酸十一酯	2212	2222	2233	2755	2772	2796
对氯苯甲酸十二酯	2312	2322	2333	2856	2874	2898

表 17-51　氯代苯氧基脂肪酸（甲酯衍生物）保留指数[16]

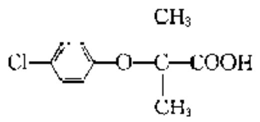
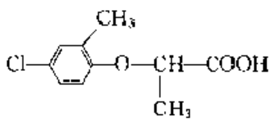
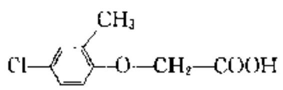
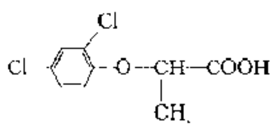
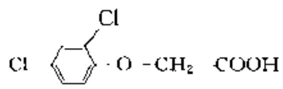
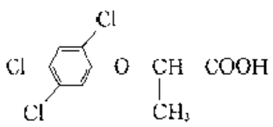
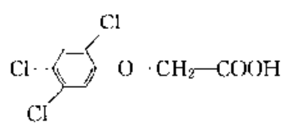
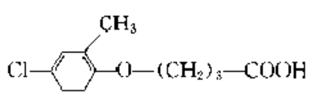
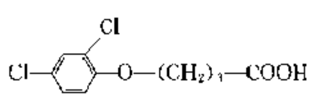
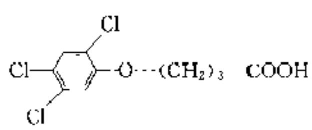
固定液	DC-200	DC-11	OV-17	QF-1	XE-60	OV-225	NPGA	FFAP	OV-275
柱温/℃ \ I \ 化合物	165	175		165	175				
	1473	1498	1706	1886	1903	1955	1948	2025	2152
	1519	1546	1769	1944	1984	2035	2037	2115	2226
	1523	1549	1812	1993	2057	2113	2143	2242	2360
	1576	1597	1846	2033	2087	2141	2143	2242	2345
	1593	1615	1899	2097	2189	2241	2270	2395	2520
	1716	1738	1988	2169	2234	2287	2299	2371	2445
	1736	1753	2049	2241	2348	2402	2453	2551	2643
	1740	1756	2024	2233	2287	2336	2352	2420	2508
	1799	1813	2105	2316	2393	2443	2460	2551	2628
	1955	1962	2266	2481	2570	2620	2655	2720	2769

表 17-52 氯代苯氧基脂肪酸（PFB衍生物）保留指数（一）[116]

柱温：210℃

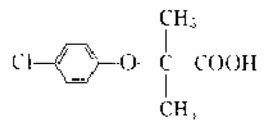
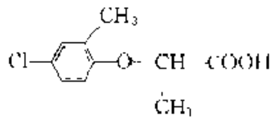
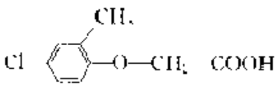
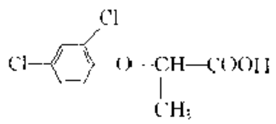
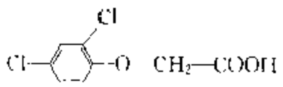
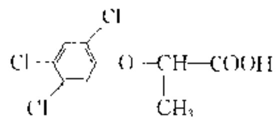
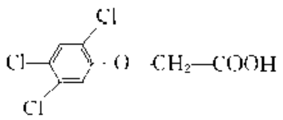
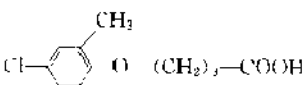
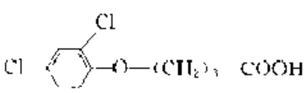
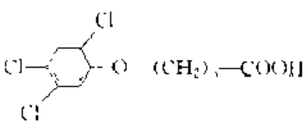
固定液 / I / 化合物	DC-200	DC-11	OV 17	QF-1	XE-60	OV 225	NPGA	FFAP	OV-275
	1934	1953	2161	2573	2546	2563	2555	2525	2745
	1977	1997	2229	2634	2626	2647	2651	2619	2818
	2020	2037	2315	2731	2759	2771	2820	2820	3002
	2043	2060	2315	2731	2759	2771	2776	2758	2948
	2089	2118	2408	2847	2909	2919	2963	2980	3181
	2179	2191	2459	2880	2909	2919	2942	2902	3059
	2228	2239	2560	3008	3078	3085	3149	3147	3302
	2262	2271	2560	3008	3021	3034	3065	3046	2181
	2323	2332	2646	3103	3134	3144	3183	3177	3302
	2489	2492	2815	3290	3347	3343	3591	3366	3459

表 17-53 氯代苯氧基脂肪酸（PFB 衍生物）保留指数（二）[19]

柱温：210℃

I 固定液 / 化合物	$C_{87}H_{156}$	DC-200	DC-11	OV-17	QF-1	XE-60	OV-225	NPGA	FFAP	OV-275
对氯苯氧基异丁酸	1848	1935	1953	2162	2574	2548	2563	2557	2521	2746
甲基氯代苯氧基-2-丙酸	1902	1978	1998	2229	2635	2627	2647	2652	2620	2819
甲基氯代苯氧基乙酸	1964	2021	2037	2316	2733	2760	2771	2821	2820	3006
2,4-二氯苯氧基-2-丙酸	1980	2044	2060	2316	2733	2760	2771	2778	2758	2952
2,4-二氯苯氧基乙酸	2041	2090	2118	2408	2849	2921	2919	2966	2982	3182
2,4,5-三氯苯氧基-2-丙酸	2118	2179	2191	2460	2882	2912	2919	2943	2904	3062
2,4,5-三氯苯氧基乙酸	2187	2228	2240	2561	3012	3080	3085	3150	3147	3304
甲基氯代苯氧基丁酸	2205	2263	2272	2561	3012	3023	3034	3067	3047	3182
2,4-二氯苯氧基丁酸	2278	2329	2332	2646	3106	3135	3144	3184	3178	3304
2,4,5-三氯苯氧基丁酸	2444	2480	2492	2815	3291	3347	3343	3392	3353	3460

表 17-54 氯代苯氧基脂肪酸甲酯保留指数[19]

固定液	$C_{87}H_{156}$	DC-200	DC-11	OV-17	QF-1	XE-60	OV-225	NPGA	FFAP	OV-275
I 柱温/℃ / 化合物	165		175		165	175				125
对氯苯氧基异丁酸甲酯	1444	1475	1498	1703	1891	1907	1955	1950	2025	2156
甲基氯代苯氧基-2-丙酸甲酯	1497	1519	1546	1769	1947	1985	2035	2038	2115	2227
甲基氯代苯氧基乙酸甲酯	1522	1524	1549	1812	1994	2059	2113	2144	2242	2362
2,4-二氯苯氧基-2-丙酸甲酯	1567	1576	1597	1847	2034	2089	2142	2144	2242	2347
2,4-二氯苯氧基乙酸甲酯	1594	1594	1615	1900	2099	2189	2241	2271	2395	2521
2,4,5-三氯苯氧基-2-丙酸甲酯	1705	1716	1738	1988	2170	2235	2288	2300	2371	2446
2,4,5-三氯苯氧基乙酸甲酯	1734	1736	1753	2049	2241	2349	2403	2453	2551	2644
甲基氯代苯氧基丁酸甲酯	1734	1740	1756	2024	2236	2288	2337	2352	2420	2510
2,4-二氯苯氧基丁酸甲酯	1796	1800	1813	2106	2316	2393	2444	2461	2551	2628
2,4,5-三氯苯氧基丁酸甲酯	1968	1955	1962	2266	2470	2570	2619	2651	2719	2769

表 17-55 脂肪酸氯乙酯保留指数（一）[41]

固定液：SE-30

I 柱温/℃ / 化合物	140	160	180	200	220	240	260
乙酸-2-氯乙酯	816	828	846	—	—	—	—
丙酸-2-氯乙酯	903	909	920	950	961	1027	—
丁酸-2-氯乙酯	990	976	1010	1023	1031	1100	—
戊酸-2-氯乙酯	1090	1086	1109	1119	1126	1174	—
己酸-2-氯乙酯	1192	1187	1202	1207	1218	1262	1108
庚酸-2-氯乙酯	1292	1290	1300	1305	1313	1346	1230
辛酸-2-氯乙酯	1391	1392	1399	1400	1406	1430	1350
壬酸-2-氯乙酯	1492	1493	1497	1497	1505	1526	1477
癸酸-2-氯乙酯	1591	1593	1596	1596	1604	1622	1600
十一酸-2-氯乙酯	1693	1693	1697	1699	1712	1725	1693
十二酸-2-氯乙酯	1792	1793	1797	1800	1808	1815	1797
十三酸-2-氯乙酯	—	1893	1896	1903	1907	1915	1902
十四酸-2-氯乙酯	—	1994	1996	2002	2004	2011	2009

续表

柱温/℃ I 化合物	140	160	180	200	220	240	260
十五酸-2-氯乙酯	—		2094	2102	2107	2112	2107
十六酸-2-氯乙酯	—	—	2196	2202	2207	2212	2210
十七酸-2-氯乙酯	—	—	—	2302	2309	2315	2312
十八酸-2-氯乙酯	—	—	—	2403	2409	2414	2412
十九酸-2-氯乙酯	—	—	—	—	2510	2515	2511
二十酸-2-氯乙酯		—	—	—	2611	2616	2612
乙酸-2,2-二氯乙酯	892	911	919	942	977	—	—
丙酸-2,2-二氯乙酯	988	989	991	1010	1035	—	—
丁酸-2,2-二氯乙酯	1080	1081	1089	1105	1126	1123	1098
戊酸-2,2-二氯乙酯	1178	1184	1180	1200	1224	1219	1201
己酸-2,2-二氯乙酯	1278	1282	1283	1297	1318	1314	1300
庚酸-2,2-二氯乙酯	1378	1381	1384	1392	1412	1405	1392
辛酸-2,2-二氯乙酯	1477	1483	1486	1490	1502	1500	1494
壬酸-2,2-二氯乙酯	1577	1583	1586	1587	1600	1597	1609
癸酸-2,2-二氯乙酯	1678	1681	1685	1690	1701	1704	1711
十一酸-2,2-二氯乙酯	1778	1781	1785	1791	1799	1800	1809
十二酸-2,2-二氯乙酯	—	1880	1884	1893	1899	1905	1909
十三酸-2,2-二氯乙酯		1981	1986	1992	1998	2003	2014
十四酸-2,2-二氯乙酯		—	2082	2092	2100	2106	2115
十五酸-2,2-二氯乙酯	—	—	2184	2193	2201	2202	2214
十六酸-2,2-二氯乙酯	—	—	—	2293	2301	2305	2315
十七酸-2,2-二氯乙酯	—		—	2395	2402	2406	2413
十八酸-2,2-二氯乙酯	—	—		—	2503	2508	2512
十九酸-2,2-二氯乙酯		—	—	—	2603	2608	2612
二十酸-2,2-二氯乙酯	—	—		—	2704	2709	2715
乙酸-2,2,2-三氯乙酯	974	978	991	999	—	—	—
丙酸-2,2,2-三氯乙酯	1078	1080	1089	1094	1101	1100	—
丁酸-2,2,2-三氯乙酯	1180	1183	1191	1207	1218	1219	1166
戊酸-2,2,2-三氯乙酯	1278	1277	1284	1289	1309	1318	1288
己酸-2,2,2-三氯乙酯	1378	1376	1378	1379	1390	1400	1384
庚酸-2,2,2-三氯乙酯	1478	1477	1477	1478	1479	1484	1484
辛酸-2,2,2-三氯乙酯	1578	1577	1578	1574	1577	1574	1574
壬酸-2,2,2-三氯乙酯	1679	1676	1678	1674	1675	1680	1678
癸酸-2,2,2-三氯乙酯	1778	1776	1778	1776	1779	1780	1779
十一酸-2,2,2-三氯乙酯	—	1875	1877	1877	1876	1878	1879
十二酸-2,2,2-三氯乙酯	—	1976	1977	1977	1974	1976	1981
十二酸-2,2,2-三氯乙酯	—	—	2074	2077	2076	2077	2079
十四酸-2,2,2-三氯乙酯		—	2175	2177	2177	2176	2177
十五酸-2,2,2-三氯乙酯	—	—	—	2276	2278	2278	2277
十六酸-2,2,2-三氯乙酯	—	—	—	2377	2378	2379	2378
十七酸-2,2,2-三氯乙酯		—	—	—	2474	2482	2486
十八酸-2,2,2-三氯乙酯	—	—	—		2575	2583	2588
十九酸-2,2,2-三氯乙酯	—		—	—	2676	2683	2690
二十酸-2,2,2-三氯乙酯	—	—	—	—	2776	2783	2790

表 17-56　脂肪酸氯乙酯保留指数（ ）[41]

固定液：OV-351

I ＼ 柱温/℃ 化合物	120	140	160	180	200	220
乙酸-2-氯乙酯	1313	1365	1331	1370	—	
丙酸-2-氯乙酯	1378	1126	1391	1432	—	—
丁酸-2-氯乙酯	1473	1510	1467	1510	—	—
戊酸-2-氯乙酯	1569	1598	1560	1603	—	—
己酸-2-氯乙酯	1665	1687	1664	1701	1685	—
庚酸-2-氯乙酯	1761	1779	1765	1797	1783	—
辛酸-2-氯乙酯	1859	1876	1863	1895	1884	1900
壬酸-2-氯乙酯	1957	1973	1963	1995	1983	2001
癸酸-2-氯乙酯	2058	2071	2064	2087	2080	2101
十一酸-2-氯乙酯	2158	2168	2168	2182	2181	2200
十二酸-2-氯乙酯	2259	2268	2266	2282	2283	2301
十二酸-2-氯乙酯	2361	2368	2365	2383	2386	2399
十四酸-2-氯乙酯		2469	2469	2488	2487	2500
十五酸-2-氯乙酯	—	2571	2572	2590	2591	2599
十六酸-2-氯乙酯		2672	2675	2691	2692	2701
十七酸-2-氯乙酯	—		2777	2792	2794	2801
十八酸-2-氯乙酯	—		2881	2895	2897	2904
十九酸-2-氯乙酯	—		—	2997	2999	3009
二十酸-2-氯乙酯	—	—		3100	3102	3111
乙酸-2,2-二氯乙酯	1426	1465	1451	1480	—	—
丙酸-2,2-二氯乙酯	1495	1527	1513	1545	—	—
丁酸-2,2-二氯乙酯	1569	1598	1583	1617	—	—
戊酸-2,2-二氯乙酯	1660	1685	1669	1705	1657	—
己酸-2,2-二氯乙酯	1754	1775	1758	1797	1756	
庚酸-2,2-二氯乙酯	1850	1869	1852	1886	1854	1900
辛酸-2,2-二氯乙酯	1946	1963	1952	1982	1963	2001
壬酸-2,2-二氯乙酯	2046	2061	2055	2078	2072	2100
癸酸-2,2-二氯乙酯	2146	2158	2157	2175	2175	2197
十一酸-2,2-二氯乙酯	2245	2256	2255	2274	2275	2294
十二酸-2,2-二氯乙酯	2348	2357	2354	2373	2378	2392
十三酸-2,2-二氯乙酯		2456	2457	2476	2479	2491
十四酸-2,2-二氯乙酯	—	2558	2560	2579	2581	2590
十五酸-2,2-二氯乙酯	—	2659	2663	2680	2682	2692
十六酸-2,2-二氯乙酯	—		2765	2781	2785	2792
十七酸-2,2-二氯乙酯	—		2868	2884	2887	2895
十八酸-2,2-二氯乙酯	—	—		2985	2988	2999
十九酸-2,2-二氯乙酯	—	—		3087	3091	3101
二十酸-2,2-二氯乙酯		—	—	3189	3194	3203
乙酸-2,2,2-三氯乙酯	1422	1441	1432	1470	—	—
丙酸-2,2,2-三氯乙酯	1134	1504	1494	1532		—
丁酸-2,2,2-三氯乙酯	1559	1580	1560	1600	—	—
戊酸-2,2,2-三氯乙酯	1615	1668	1647	1688	1655	—
己酸-2,2,2-三氯乙酯	1738	1761	1739	1784	1753	—
庚酸-2,2,2-三氯乙酯	1832	1854	1840	1874	1850	1898
辛酸-2,2,2-三氯乙酯	1928	1948	1938	1966	1956	1997
壬酸-2,2,2-三氯乙酯	2026	2045	2040	2065	2058	2090
癸酸-2,2,2-三氯乙酯	2126	2140	2144	2160	2163	2183
十一酸-2,2,2-三氯乙酯	2224	2237	2240	2260	2264	2281
十二酸-2,2,2-三氯乙酯	2326	2337	2338	2360	2365	2386
十三酸-2,2,2-三氯乙酯	—	2436	2440	2462	2467	2485
十四酸-2,2,2-三氯乙酯	—	2537	2514	2565	2568	2582
十五酸-2,2,2-三氯乙酯	—	2638	2646	2664	2670	2682
十六酸-2,2,2-三氯乙酯	—		2717	2766	2772	2783
十七酸-2,2,2-三氯乙酯	—	—	2840	2867	2873	2883
十八酸-2,2,2-三氯乙酯	—	—		2969	2975	2988
十九酸-2,2,2-三氯乙酯		—	—	3070	3077	3089
二十酸-2,2,2-三氯乙酯	—		—	3172	3179	3192

表 17-57 脂肪酸酯与脂肪酸氯酯的保留指数[54]

固定液：SP-400 柱温：80℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
乙酸丙酯	708.12	异己酸-3-氯丙酯	1289.78	异戊酸异丙酯	851.09
丙酸丙酯	803.78	乙酸-2,3-二氯丙酯	1068.23	异己酸异丙酯	1000.44
丁酸丙酯	893.21	丙酸-2,3-二氯丙酯	1159.32	丙酸-1,3-二氯异丙酯	1138.77
戊酸丙酯	992.95	丁酸-2,3-二氯丙酯	1245.84	丁酸-1,3-二氯异丙酯	1225.19
己酸丙酯	1092.13	戊酸-2,3-二氯丙酯	1342.85	戊酸-1,3-二氯异丙酯	1321.34
异丁酸丙酯	852.09	己酸-2,3-二氯丙酯	1439.03	己酸-1,3-二氯异丙酯	1417.52
异戊酸丙酯	946.59	异丁酸-2,3-二氯丙酯	1200.98	异丁酸-1,3-二氯异丙酯	1178.06
异己酸丙酯	1058.13	异戊酸-2,3-二氯丙酯	1296.27	异戊酸-1,3-二氯异丙酯	1276.68
乙酸-3-氯丙酯	946.50	异己酸-2,3-二氯丙酯	1403.94	异己酸-1,3-二氯异丙酯	1383.13
丙酸-3-氯丙酯	1039.89	丙酸异丙酯	747.78	乙酸丁酯	809.04
丁酸-3-氯丙酯	1127.92	丁酸异丙酯	837.19	丙酸丁酯	903.41
戊酸-3-氯丙酯	1225.70	戊酸异丙酯	935.82	丁酸丁酯	992.26
异丁酸-3-氯丙酯	1083.62	己酸异丙酯	1034.05	戊酸丁酯	1088.90
异戊酸-3-氯丙酯	1178.51	异丁酸异丙酯	792.52	己酸丁酯	1189.00

表 17-58 脂肪酸酯与脂肪酸氯丙酯的保留指数[52]

固定液：SP-400 柱温：200℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
己酸丙酯	1092.98	己酸-2,3-二氯丙酯	1464.68	己酸-1,3-二氯异丙酯	1437.17
庚酸丙酯	1191.40	庚酸-2,3-二氯丙酯	1563.46	庚酸-1,3-二氯异丙酯	1535.82
辛酸丙酯	1287.80	辛酸-2,3-二氯丙酯	1662.40	辛酸-1,3-二氯异丙酯	1634.45
壬酸丙酯	1387.36	壬酸-2,3-二氯丙酯	1762.16	壬酸-1,3-二氯异丙酯	1733.94
癸酸丙酯	1487.46	癸酸-2,3-二氯丙酯	1861.09	癸酸-1,3-二氯异丙酯	1833.40
十二酸丙酯	1687.03	己酸异丙酯	1037.56	己酸丁酯	1187.21
十四酸丙酯	1888.09	庚酸异丙酯	1133.33	庚酸丁酯	1280.02
十六酸丙酯	2088.18	辛酸异丙酯	1225.62	辛酸丁酯	1385.74
己酸-3-氯丙酯	1337.77	壬酸异丙酯	1324.16	壬酸丁酯	1484.62
庚酸-3-氯丙酯	1436.66	癸酸异丙酯	1424.13	癸酸丁酯	1584.27
辛酸-3-氯丙酯	1536.39	十二酸异丙酯	1622.57	十二酸丁酯	1783.57
壬酸-3-氯丙酯	1635.29	十四酸异丙酯	1822.74	十四酸丁酯	1984.9[illegible]
癸酸-3-氯丙酯	1737.21	十六酸异丙酯	2023.3[illegible]	十六酸丁酯	2185.96

表 17-59 乙酸氯酯保留指数（一）[51]

固定液：SE-30

化合物 \ I \ 柱温/℃	60	80	100	120	140	化合物 \ I \ 柱温/℃	60	80	100	120	140	化合物 \ I \ 柱温/℃	60	80	100	120	140
乙酸甲酯	509	505	505	—	—	乙酸-2-氯丙酯	864	848	835	831	—	乙酸戊酯	—	912	885	867	879
乙酸氯甲酯	691	680	674	—		乙酸-3-氯丙酯	924	916	902	895	—	乙酸-1-氯戊酯	—	1026	1006	996	[illegible]
乙酸乙酯	613	577	607	—	—	乙酸丁酯	—	810	786	774	781	乙酸-2-氯戊酯	—	1051	1033	1017	[illegible]
乙酸-1-氯乙酯	744	724	726	—	—	乙酸-1-氯丁酯	—	930	906	895	912	乙酸-3-氯戊酯	—	1078	1062	1048	1072
乙酸-2-氯乙酯	817	801	796	—	—	乙酸-2-氯丁酯	—	964	944	930	951	乙酸-4-氯戊酯	—	1089	1073	1058	1081
乙酸丙酯	711	685	676	696	—	乙酸-3-氯丁酯	—	981	961	949	972	乙酸-5-氯戊酯	—	1143	1129	1116	1112
乙酸-1-氯丙酯	838	821	806	805	—	乙酸-4-氯丁酯	—	1038	1021	1008	1033						

表 17-60 乙酸氯酯保留指数（二）[51]

固定液：SE-30

化合物 \ I \ 柱温/℃	100	120	140	160	180	200	220
乙酸己酯	1008	972	993	1000	—	—	—
乙酸-1-氯己酯	1117	1086	1108	1114	—	—	—
乙酸-2-氯己酯	1147	1121	1143	1151	—	—	—
乙酸-3-氯己酯	1166	1143	1166	1173	—	—	—
乙酸-4-氯己酯	1186	1163	1187	1194	—	—	—
乙酸-5-氯己酯	1194	1171	1194	1202		—	—
乙酸-6-氯己酯	1247	1227	1249	1257	—	—	—
乙酸庚酯	1095	1070	1086	1090	1093	—	—
乙酸-1-氯庚酯	1211	1191	1211	1215	1212		—
乙酸-2-氯庚酯	1235	1217	1239	1244	1242	—	—
乙酸-3-氯庚酯	1254	1238	1260	1266	1262	—	—
乙酸-4-氯庚酯	1266	1251	1273	1278	1276	—	—
乙酸-5-氯庚酯	1284	1269	1292	1297	1295	—	—
乙酸-6-氯庚酯	1291	1276	1298	1303	1299	—	—
乙酸-7-氯庚酯	1342	1329	1350	1354	1354		—
乙酸辛酯	1194	1165	1188	1189	1190	1178	—
乙酸-1-氯辛酯	1306	1287	1312	1314	1315	1310	—
乙酸-2-氯辛酯	1328	1312	1338	1343	1344	1340	—
乙酸-3-氯辛酯	1345	1331	1358	1362	1364	1364	—
乙酸-4-氯辛酯	1355	1342	1369	1373	1373	1375	—
乙酸-5-氯辛酯	1365	1352	1379	1384	1385	1384	—
乙酸-6-氯辛酯	1382	1370	1396	1402	1405	1404	—
乙酸-7-氯辛酯	1385	1372	1399	1403	1405	1404	—
乙酸-8-氯辛酯	1435	1425	1451	1456	1458	1459	—
乙酸壬酯	—	1292	1292	1293	1293	1285	—
乙酸-1-氯壬酯	—	1408	1414	1415	1416	1412	—
乙酸-2-氯壬酯	—	1432	1439	1442	1444	1443	—
乙酸-3-氯壬酯	—	1451	1458	1461	1463	1463	—
乙酸-4-氯壬酯	—	1460	1467	1472	1472	1473	—
乙酸-5-氯壬酯	—	1469	1477	1481	1483	1483	—
乙酸-6-氯壬酯	—	1478	1486	1490	1492	1493	—
乙酸-7-氯壬酯	—	1491	1499	1505	1506	1511	—
乙酸-8-氯壬酯	—	1494	1501	1506	1507	1511	—
乙酸-9-氯壬酯	—	1545	1553	1558	1560	1564	—
乙酸癸酯	—	—	1393	1393	1389	1384	—
乙酸-1-氯癸酯	—	—	1512	1515	1514	1513	
乙酸-2-氯癸酯	—	—	1537	1542	1542	1544	—
乙酸-3-氯癸酯	—	—	1555	1561	1562	1564	
乙酸-4-氯癸酯	—	—	1565	1570	1572	1573	
乙酸-5-氯癸酯	—	—	1573	1578	1580	1582	—
乙酸-6-氯癸酯	—	—	1580	1585	1588	1589	—
乙酸-7-氯癸酯	—	—	1585	1591	1594	1595	—
乙酸-8-氯癸酯	—	—	1599	1606	1608	1610	—
乙酸-9-氯癸酯	—	—	1601	1606	1608	1610	—
乙酸-10-氯癸酯	—	—	1651	1658	1661	1664	—
乙酸十一酯	—	—	1493	1495	1493	1487	1491
乙酸-1-氯十一酯	—		1612	1616	1618	1616	1617

续表

化合物 \ I \ 柱温/℃	100	120	140	160	180	200	220
乙酸-2-氯十一酯	—	—	1637	1643	1646	1646	1649
乙酸-3-氯十一酯	—	—	1655	1661	1665	1666	1671
乙酸-4-氯十一酯		—	1664	1670	1675	1676	1679
乙酸-5-氯十一酯	—	—	1672	1678	1682	1684	1687
乙酸-6-氯十一酯	—	—	1678	1685	1689	1690	1693
乙酸-7-氯十一酯	—		1682	1689	1692	1694	1695
乙酸-8-氯十一酯	—	—	1686	1694	1698	1700	1702
乙酸-9-氯十一酯		—	1700	1708	1712	1715	1716
乙酸-10-氯十一酯	—	—	1700	1708	1712	1715	1718
乙酸-11-氯十一酯	—	—	1752	1759	1764	1768	1769

表 17-61 乙酸氯酯保留指数（三）[51]

固定液：SE-30

化合物 \ I \ 柱温/℃	160	180	200	220	240
乙酸十二酯	1596	1594	1594	1591	—
乙酸-1-氯十二酯	1716	1717	1718	1716	—
乙酸-2-氯十二酯	1743	1745	1747	1747	—
乙酸-3-氯十二酯	1761	1764	1767	1767	—
乙酸-4-氯十二酯	1770	1774	1776	1777	
乙酸-5-氯十二酯	1777	1781	1784	1784	—
乙酸-6-氯十二酯	1783	1787	1790	1791	—
乙酸-7-氯十二酯	1786	1789	1791	1791	—
乙酸-8-氯十二酯	1789	1794	1796	1797	—
乙酸-9-氯十二酯	1794	1798	1801	1802	—
乙酸-10-氯十二酯	1807	1812	1815	1816	—
乙酸-11-氯十二酯	1808	1812	1815	1816	—
乙酸-12-氯十二酯	1859	1865	1868	1869	—
乙酸十四酯	—	1797	1795	1793	1796
乙酸-1-氯十四酯	—	1918	1917	1918	1924
乙酸-2-氯十四酯	—	1947	1946	1949	1956
乙酸-3-氯十四酯	—	1966	1966	1970	1975
乙酸-4-氯十四酯	—	1974	1975	1979	1985
乙酸-5-氯十四酯	—	1982	1983	1986	1993
乙酸-6-氯十四酯	—	1988	1989	1992	1997
乙酸-7-氯十四酯	—	1988	1989	1992	1997
乙酸-8-氯十四酯	—	1991	1992	1996	2000
乙酸-9-氯十四酯	—	1992	1993	1996	2000
乙酸-10-氯十四酯	—	1996	1997	2000	2005
乙酸-11-氯十四酯	—	2000	2002	2005	2012
乙酸-12-氯十四酯	—	2014	2015	2019	2026
乙酸-13-氯十四酯	—	2014	2015	2019	2026
乙酸-14-氯十四酯	—	2066	2068	2072	2080

表 17-62　乙酸氯酯保留指数（四）[51]

固定液：OV-351

化合物 \ I \ 柱温/℃	60	80	100	120	110	160
乙酸甲酯	823	839	844	877	—	
乙酸氯甲酯	1181	1180	1164	1174		—
乙酸乙酯	881	880	875	908		—
乙酸-1-氯乙酯	1150	1153	1123	1130	1202	—
乙酸-2-氯乙酯	1315	1319	1297	1299	1354	—
乙酸丙酯	981	978	943	992	1075	—
乙酸-1-氯丙酯	1217	1222	1198	1207	1278	—
乙酸-2-氯丙酯	1296	1304	1283	1289	1348	—
乙酸-3-氯丙酯	1418	1425	1414	1419	1470	
乙酸丁酯	1080	1079	1053	1064	1154	—
乙酸-1-氯丁酯	1292	1298	1278	1279	1342	—
乙酸-2-氯丁酯	1377	1384	1370	1375	1425	—
乙酸-3-氯丁酯	1424	1432	1422	1427	1478	—
乙酸-4-氯丁酯	1523	1539	1533	1540	1585	—
乙酸戊酯	—	—	1195	1182	1212	1232
乙酸-1-氯戊酯	—		1401	1387	1419	1408
乙酸-2-氯戊酯	—	—	1469	1460	1492	1497
乙酸-3-氯戊酯	—	—	1528	1525	1558	1562
乙酸-4-氯戊酯		—	1563	1564	1594	1594
乙酸-5-氯戊酯	—		1652	1657	1687	1691

表 17-63　乙酸氯酯保留指数（五）[51]

固定液：OV-351

化合物 \ I \ 柱温/℃	100	120	140	160	180	200	220
乙酸己酯	1277	1255	1286	1295	1277	—	—
乙酸-1-氯己酯	1472	1457	1492	1500	1485	—	—
乙酸-2-氯己酯	1540	1532	1576	1574	1575		—
乙酸-3-氯己酯	1581	1578	1627	1629	1628	—	
乙酸-4-氯己酯	1626	1627	1679	1679	1686	—	
乙酸-5-氯己酯	1647	1650	1700	1703	1711	—	—
乙酸-6-氯己酯	1747	1737	1789	1796	1802	—	—
乙酸庚酯	1385	1372	1401	1400	1385	—	
乙酸-1-氯庚酯	1582	1578	1602	1607	1615	—	
乙酸-2-氯庚酯	1647	1647	1673	1673	1675	—	—
乙酸-3-氯庚酯	1686	1691	1718	1720	1725	—	
乙酸-4-氯庚酯	1717	1723	1753	1757	1759	—	—
乙酸-5-氯庚酯	1749	1756	1787	1791	1797	—	—
乙酸-6-氯庚酯	1767	1775	1806	1809	1818	—	—
乙酸-7-氯庚酯	1846	1857	1889	1894	1904	—	—
乙酸辛酯	1468	1454	1490	1486	1485	—	—
乙酸-1-氯辛酯	1659	1658	1702	1704	1711	—	—
乙酸-2-氯辛酯	1722	1724	1771	1771	1775	—	—
乙酸-3-氯辛酯	1758	1764	1814	1819	1824	—	—
乙酸-4-氯辛酯	1787	1794	1845	1850	1856	—	—
乙酸-5-氯辛酯	1802	1811	1862	1867	1874	—	
乙酸-6-氯辛酯	1830	1840	1893	1899	1909	—	—
乙酸-7-氯辛酯	1842	1852	1905	1912	1922	—	—
乙酸-8-氯辛酯	1918	1932	1987	1994	2006	—	—
乙酸壬酯	—	1568	1593	1602	1579	1617	—
乙酸-1-氯壬酯	—	1769	1798	1799	1802	1793	—
乙酸-2-氯壬酯	—	1838	1869	1872	1872	1886	

续表

I 柱温/°C 化合物	100	120	140	160	180	200	220
乙酸-3-氯壬酯	—	1883	1912	1917	1922	1937	—
乙酸-4-氯壬酯	—	1907	1940	1945	1953	1961	
乙酸-5-氯壬酯	—	1920	1956	1960	1967	1978	
乙酸-6-氯壬酯	—	1933	1969	1976	1984	1996	
乙酸-7-氯壬酯	—	1957	1994	2002	2010	2022	
乙酸-8-氯壬酯		1967	2004	2012	2020	2032	—
乙酸-9-氯壬酯	—	2047	2086	2095	2106	2118	
乙酸癸酯		—	1699	1691	1688	1713	—
乙酸-1-氯癸酯		—	1900	1897	1901	1914	—
乙酸-2-氯癸酯		—	1969	1970	1976	1985	—
乙酸-3-氯癸酯		·	2011	2014	2026	2030	—
乙酸-4-氯癸酯		—	2038	2042	2054	2060	—
乙酸-5-氯癸酯		—	2031	2055	2067	2072	—
乙酸-6-氯癸酯	—	—	2062	2067	2079	2086	—
乙酸-7-氯癸酯	—	—	2070	2076	2090	2096	—
乙酸-8-氯癸酯	—		2093	2100	2115	2122	—
乙酸-9-氯癸酯	—	—	2104	2111	2126	2133	—
乙酸-10-氯癸酯	—	—	2185	2193	2210	2215	
乙酸十一酯	—	—	1802	1804	1808	1800	1819
乙酸-1-氯十一酯	—	—	2000	2000	2005	2013	2044
乙酸-2-氯十一酯		—	2070	2072	2080	2086	2099
乙酸-3-氯十一酯	—	—	2111	2117	2127	2134	2149
乙酸-4-氯十一酯	—	—	2138	2144	2154	2160	2179
乙酸-5-氯十一酯	—	—	2150	2157	2167	2175	2191
乙酸-6-氯十一酯		—	2159	2166	2177	2185	2200
乙酸-7-氯十一酯	—	—	2164	2172	2183	2190	2202
乙酸-8-氯十一酯	—	—	2171	2180	2192	2199	2214
乙酸-9-氯十一酯	—	—	2195	2204	2217	2225	2241
乙酸-10-氯十一酯	—	—	2205	2214	2227	2237	2252
乙酸-11-氯十一酯	—	—	2285	2294	2311	2320	2336

表 17-64 乙酸氯酯保留指数（六）[50]

固定液：OV-351

I 柱温/°C 化合物	160	180	200	220	I 柱温/°C 化合物	160	180	200	220
乙酸十二酯	1876	1896	1898	1900	乙酸-1-氯十四酯	2305	2319	2317	2323
乙酸-1-氯十二酯	2097	2079	2099	2099	乙酸-2-氯十四酯	2368	2382	2385	2395
乙酸-2-氯十二酯	2170	2179	2179	2183	乙酸-3-氯十四酯	2412	2427	2433	2447
乙酸-3-氯十二酯	2213	2225	2230	2236	乙酸-4-氯十四酯	2439	2453	2460	2477
乙酸-4-氯十二酯	2239	2252	2256	2265	乙酸-5-氯十四酯	2450	2464	2472	2486
乙酸-5-氯十二酯	2251	2264	2269	2278	乙酸-6-氯十四酯	2458	2472	2480	2494
乙酸-6-氯十二酯	2260	2273	2279	2287	乙酸-7-氯十四酯	2460	2474	2482	2495
乙酸-7-氯十二酯	2262	2275	2280	2287	乙酸-8-氯十四酯	2463	2476	2485	2500
乙酸-8-氯十二酯	2267	2281	2287	2294	乙酸-9-氯十四酯	2464	2478	2487	2501
乙酸-9-氯十二酯	2275	2289	2296	2303	乙酸-10-氯十四酯	2468	2482	2491	2506
乙酸-10-氯十二酯	2299	2314	2320	2332	乙酸-11-氯十四酯	2475	2490	2499	2515
乙酸-11-氯十二酯	2309	2324	2332	2341	乙酸-12-氯十四酯	2498	2515	2525	2541
乙酸-12-氯十二酯	2390	2407	2416	2429	乙酸-13-氯十四酯	2509	2526	2536	2551
乙酸十四酯	2091	2103	2100	2106	乙酸-14-氯十四酯	2589	2608	2620	2635

表 17-65　乙酸氯酯保留指数（七）[51]

固定液	SE-30			OV-351		
化合物 \ I \ 柱温/℃	200	220	240	180	200	220
乙酸十六酯	1996	1994	1996	2309	2312	2312
乙酸-1-氯十六酯	2117	2117	2125	2509	2512	2523
乙酸-2-氯十六酯	2147	2148	2155	2583	2592	2601
乙酸-3-氯十六酯	2166	2168	2177	2630	2641	2652
乙酸-4-氯十六酯	2175	2177	2186	2656	2668	2680
乙酸-5-氯十六酯	2182	2184	2191	2667	2680	2691
乙酸-6-氯十六酯	2188	2191	2199	2675	2688	2699
乙酸-7-氯十六酯	2188	2191	2199	2676	2689	2700
乙酸-8-氯十六酯	2191	2193	2201	2677	2691	2701
乙酸-9-氯十六酯	2192	2193	2201	2678	2692	2703
乙酸-10-氯十六酯	2193	2195	2203	2679	2693	2704
乙酸-11-氯十六酯	2194	2196	2203	2680	2694	2705
乙酸-12-氯十六酯	2197	2199	2307	2684	2700	2712
乙酸-13-氯十六酯	2201	2204	2212	2691	2707	2720
乙酸-14-氯十六酯	2215	2219	2227	2716	2732	2745
乙酸-15-氯十六酯	2215	2219	2227	2727	2743	2757
乙酸-16-氯十六酯	2267	2271	2280	2809	2826	2840

表 17-66　乙酸氯酯保留指数（八）[51]

固定液	SE-30			OV-351		固定液	SE-30			OV-351	
化合物 \ I \ 柱温/℃	220	240	260	200	220	化合物 \ I \ 柱温/℃	220	240	260	200	220
乙酸十八酯	2193	2198	2192	2516	2516	乙酸-10-氯十八酯	2393	2403	2402	2892	2901
乙酸-1-氯十八酯	2315	2324	2322	2693	2709	乙酸-11-氯十八酯	2393	2404	2403	2893	2902
乙酸-2-氯十八酯	2347	2356	2355	2781	2796	乙酸-12-氯十八酯	2394	2404	2403	2894	2902
乙酸-3-氯十八酯	2367	2377	2378	2844	2853	乙酸-13-氯十八酯	2395	2405	2404	2894	2903
乙酸-4-氯十八酯	2376	2386	2386	2870	2380	乙酸-14-氯十八酯	2397	2407	2408	2899	2909
乙酸-5-氯十八酯	2383	2392	2394	2882	2892	乙酸-15-氯十八酯	2402	2413	2414	2907	2918
乙酸-6-氯十八酯	2389	2400	2400	2889	2897	乙酸-16-氯十八酯	2415	2427	2430	2933	2946
乙酸-7-氯十八酯	2389	2401	2400	2889	2897	乙酸-17-氯十八酯	2416	2427	2430	2944	2956
乙酸-8-氯十八酯	2391	2402	2401	2890	2899	乙酸-18-氯十八酯	2468	2480	2484	3027	3041
乙酸-9-氯十八酯	2392	2403	2402	2891	2900						

表 17-67　脂肪酸五氟苄基酯保留指数[47]

固定液	OV-1	DB-210	OV-225	固定液	OV-1	DB-210	OV-225
化合物 \ I \ 柱温/℃	230	200	190	化合物 \ I \ 柱温/℃	230	200	190
己酸五氟苄基酯	1420	—	1810	十七酸五氟苄基酯	2505	2826	2916
庚酸五氟苄基酯	1521	—	1918	硬脂酸五氟苄基酯	2601	2929	3020
辛酸五氟苄基酯	1619	—	2012	油酸五氟苄基酯	2583	2913	3036
癸酸五氟苄基酯	1818	—	2203	亚油酸五氟苄基酯	2576	2921	3082
月桂酸五氟苄基酯	2028	2312	2410	十九酸五氟苄基酯	2704	3037	3123
肉豆蔻酸五氟苄基酯	2205	2520	2614	花生酸五氟苄基酯	2804	3167	3222
肉豆蔻脑酸五氟苄基酯	2194	2525	2647	花生四烯酸五氟苄基酯	2741	3188	3273
棕榈酸五氟苄基酯	2401	2724	2812	山萮酸五氟苄基酯	2999	3354	3401
棕榈油酸五氟苄基酯	2385	2717	2838				

表 17-68　乙酸氯苯酯保留指数（一）[22]

固定液：SE-30

I　柱温/℃ 化合物	160	180	200	I　柱温/℃ 化合物	160	180	200
乙酸苯酯	1008	1025	1053	乙酸-2,4,6-三氯苯酯	1420	1454	1546
乙酸-2-氯苯酯	1173	1192	1199	乙酸-2,3,6-三氯苯酯	1463	1495	1591
乙酸-3-氯苯酯	1198	1219	1228	乙酸-2,3,5-三氯苯酯	1476	1506	1601
乙酸-4-氯苯酯	1203	1224	1228	乙酸-2,4,5-三氯苯酯	1481	1511	1606
乙酸-2,6-二氯苯酯	1296	1330	1396	乙酸-2,3,4-三氯苯酯	1525	1552	1651
乙酸-2,4-二氯苯酯	1317	1351	1420	乙酸-3,4,5-三氯苯酯	1543	1569	1667
乙酸-2,5-二氯苯酯	1317	1351	1420	乙酸-2,3,5,6-四氯苯酯	1612	1633	1732
乙酸-3,5-二氯苯酯	1334	1367	1441	乙酸-2,3,4,6-四氯苯酯	1617	1637	1735
乙酸-2,3-二氯苯酯	1350	1384	1466	乙酸-2,3,4,5-四氯苯酯	1679	1694	1790
乙酸-3,4-二氯苯酯	1377	1410	1494	乙酸-2,3,4,5,6-五氯苯酯	1808	1809	1899

表 17-69　乙酸氯苯酯保留指数（二）[22]

固定液：OV-351

I　柱温/℃ 化合物	160	180	200	I　柱温/℃ 化合物	160	180	200
乙酸苯酯	1633	1639	1664	乙酸-3,4-二氯苯酯	2072	2086	2113
乙酸-2-氯苯酯	1829	1838	1858	乙酸-2,3,5-三氯苯酯	2117	2133	2160
乙酸-3-氯苯酯	1848	1856	1876	乙酸-2,4,5-三氯苯酯	2133	2150	2177
乙酸-4-氯苯酯	1870	1878	1898	乙酸-2,3,6-三氯苯酯	2139	2159	2187
乙酸-3,5-二氯苯酯	1964	1976	1993	乙酸-3,4,5-三氯苯酯	2215	2236	2267
乙酸-2,6-二氯苯酯	1971	1985	2007	乙酸-2,3,5,6-四氯苯酯	2225	2248	2281
乙酸-2,4-二氯苯酯	1986	1998	2016	乙酸-2,3,4-三氯苯酯	2233	2254	2286
乙酸-2,5-二氯苯酯	1986	1998	2016	乙酸-2,3,4,6-四氯苯酯	2236	2260	2294
乙酸-2,4,6-三氯苯酯	2035	2050	2075	乙酸-2,3,4,5-四氯苯酯	2333	2358	2397
乙酸-2,3-二氯苯酯	2052	2067	2093	乙酸-2,3,4,5,6-五氯苯酯	2401	2433	2479

表 17-70　乙酸氯苯酯保留指数（三）[illegible]

柱温：160℃

I　固定液 化合物	SE-30	OV-351	I　固定液 化合物	SE-30	OV-351
乙酸苯酯	1008	1633	乙酸-2,4,6-三氯苯酯	1420	2035
乙酸-2-氯苯酯	1173	1829	乙酸-2,3,6-三氯苯酯	1463	2139
乙酸-3-氯苯酯	1198	1848	乙酸-2,3,5-三氯苯酯	1476	2117
乙酸-4-氯苯酯	1203	1870	乙酸-2,4,5-三氯苯酯	1481	2133
乙酸-2,6-二氯苯酯	1296	1971	乙酸-2,3,4-三氯苯酯	1525	2233
乙酸-2,4-二氯苯酯	1317	1986	乙酸-3,4,5-三氯苯酯	1543	2215
乙酸-2,5-二氯苯酯	1317	1986	乙酸-2,3,5,6-四氯苯酯	1612	2225
乙酸-3,5-二氯苯酯	1334	1964	乙酸-2,3,4,6-四氯苯酯	1617	2236
乙酸-2,3-二氯苯酯	1350	2052	乙酸-2,3,4,5-四氯苯酯	1679	2233
乙酸-3,4-二氯苯酯	1377	2072	乙酸-2,3,4,5,6-五氯苯酯	1800	2401

表 17-71 氯代脂肪酸氯甲酯保留指数[30]

固 定 液	SE-30					Carbowax 20M				
I 柱温/°C 化合物	100	120	140	160	180	100	120	140	160	180
戊酸一氯甲酯	989	967	953	997	—	1374	1376	1396	1417	—
2-氯戊酸一氯甲酯	1113	1986	1108	1108	—	1606	1619	1628	1646	—
3-氯戊酸一氯甲酯	1142	1126	1136	1133	—	1694	1709	1721	1735	—
4-氯戊酸一氯甲酯	1166	1153	1160	1153	—	1730	1749	1760	1780	
5-氯戊酸一氯甲酯	1227	1225	1228	1214		1851	1867	1882	1904	—
己酸一氯甲酯	1069	1051	1072	1084	—	—	1477	1493	1513	—
2-氯己酸一氯甲酯	1194	1204	1207	1199		—	1704	1713	1733	—
3-氯己酸一氯甲酯	1214	1227	1229	1220	—	—	1775	1786	1807	—
4-氯己酸一氯甲酯	1246	1264	1262	1253	—	—	1822	1837	1863	—
5-氯己酸一氯甲酯	1259	1277	1275	1265	—	—	1867	1883	1905	—
6-氯己酸一氯甲酯	1320	1341	1337	1327	—	—	1961	1979	2002	—
庚酸一氯甲酯	—	1197	1195	1164	1181	—	1565	1582	1603	1609
2-氯庚酸一氯甲酯	—	1328	1307	1293	1316	—	1787	1807	1820	1820
3-氯庚酸一氯甲酯	—	1348	1328	1313	1334	—	1854	1875	1894	1894
4-氯庚酸一氯甲酯	—	1373	1352	1340	1360	—	1886	1910	1933	1935
5-氯庚酸一氯甲酯	—	1394	1376	1365	1388		1939	1964	1988	1988
6-氯庚酸一氯甲酯	—	1406	1387	1376	1395	—	1964	1988	2012	2018
7-氯庚酸一氯甲酯	—	1457	1442	1443	1452	—	2045	2070	2096	2105
辛酸一氯甲酯	—	—	1278	1263	1286	—	—	1684	1700	1719
2-氯辛酸一氯甲酯	—	—	1406	1394	1417	—	—	1907	1918	1919
3-氯辛酸一氯甲酯	—	—	1425	1414	1434	—	—	1969	1984	1988
4-氯辛酸一氯甲酯	—	—	1451	1443	1458	—	—	2002	2020	2031
5-氯辛酸一氯甲酯		—	1464	1456	1470	—	—	2039	2058	2068
6-氯辛酸一氯甲酯	—	—	1487	1481	1494	—	—	2075	2096	2107
7-氯辛酸一氯甲酯	—	—	1491	1484	1498	—	—	2086	2108	2121
8-氯辛酸一氯甲酯	—	—	1545	1545	1555	—	—	2167	2191	2206
壬酸一氯甲酯	—	—	1380	1364	1380		—	1776	1798	1796
2-氯壬酸一氯甲酯	—	—	1508	1501	1509	—	—	1996	2014	2013
3-氯壬酸一氯甲酯	—	—	1526	1521	1529	—	—	2059	2081	2084
4-氯壬酸一氯甲酯		—	1551	1549	1556	—	—	2090	2115	2122
5-氯壬酸一氯甲酯	—	—	1562	1561	1567	—	—	2123	2149	2160
6-氯壬酸一氯甲酯	—	—	1576	1578	1582	—	—	2144	2171	2182
7-氯壬酸一氯甲酯	—	—	1591	1594	1597	—	—	2166	2195	2207
8-氯壬酸一氯甲酯	—	—	1594	1599	1601	—	—	2178	2207	2220
9-氯壬酸一氯甲酯	—	—	1647	1657	1654	—	—	2255	2286	2302
癸酸一氯甲酯	—	1479	1470	1483	1481	—	1872	1889	1895	1898
2-氯癸酸一氯甲酯	—	1608	1613	1610	1615	—	2091	2108	2114	2118
3-氯癸酸一氯甲酯	—	1625	1636	1628	1636	—	2155	2173	2185	2189
4-氯癸酸一氯甲酯		1650	1664	1654	1658	—	2193	2212	2227	2233
5-氯癸酸一氯甲酯	—	1659	1675	1663	1672	—	2216	2239	2255	2258
6-氯癸酸一氯甲酯		1672	1690	1678	1684	—	2234	2257	2276	2277
7-氯癸酸一氯甲酯		1679	1698	1686	1691	—	2241	2265	2285	2287
8-氯癸酸一氯甲酯		1693	1716	1701	1707	—	2264	2289	2311	2311
9-氯癸酸一氯甲酯	—	1696	1719	1704	1709	—	2274	2299	2321	2320
10-氯癸酸一氯甲酯	—	1747	1775	1755	1761	—	2349	2376	2401	2403
十一酸一氯甲酯	—	1581	1581	1585	1592	—	—	1990	1996	2008
2-氯十一酸一氯甲酯		1709	1722	1712	1715	—	—	2206	2207	2224

续表

固定液	SE-30					Carbowax 20M				
I 柱温/℃ 化合物	100	120	140	160	180	100	120	140	160	180
3-氯十一酸一氯甲酯	—	1726	1746	1730	1736	—	—	2273	2287	2290
4-氯十一酸一氯甲酯	—	1750	1773	1755	1761	—	—	2326	2344	2348
5-氯十一酸一氯甲酯	—	1758	1783	1764	1771	—	-	2335	2353	2360
6-氯十一酸一氯甲酯	—	1770	1796	1775	1783	—	—	2350	2369	2373
7-氯十一酸一氯甲酯	—	1775	1802	1781	1789		—	2355	2374	2379
8-氯十一酸一氯甲酯	—	1781	1809	1787	1795	—	-	2362	2382	2388
9-氯十一酸一氯甲酯	—	1795	1824	1801	1811	—	—	2384	2406	2312
10-氯十一酸一氯甲酯	—	1796	1825	1802	1811	—	—	2393	2416	2422
11-氯十一酸一氯甲酯		1847	1885	1856	1861	—		2471	2499	2502
十二酸一氯甲酯	—	1682	1694	1684	1691	—	—	2089	2087	2102
2-氯十二酸一氯甲酯	—	1809	1840	1817	1826	—	—	2305	2315	2320
3-氯十二酸一氯甲酯	—	1826	1860	1834	1837	—	—	2371	2387	2391
4-氯十二酸一氯甲酯		1850	1888	1859	1863	—	—	2424	2444	2448
5-氯十二酸一氯甲酯	—	1858	1897	1867	1872	—	—	2432	2452	2457
6-氯十二酸一氯甲酯	—	1870	1910	1878	1882	—	—	2447	2470	2464
7-氯十二酸一氯甲酯	—	1874	1915	1882	1886	—	—	2448	2470	2474
8-氯十二酸一氯甲酯	—	1878	1919	1887	1891	—	—	2453	2476	2481
9-氯十二酸一氯甲酯		1882	1925	1892	1896	—	—	2459	2482	2488
10-氯十二酸一氯甲酯	—	1895	1940	1905	1910	—	—	2480	2506	2512
11-氯十二酸一氯甲酯	—	1896	1941	1906	1911	—	—	2490	2516	2521
12-氯十二酸一氯甲酯	—	1947	2005	1958	1960	—	—	2567	2597	2601

表 17-72 氯乙酸氯代烷基酯保留指数 (一)[32]

固定液：SE-30

I 柱温/℃ 化合物	80	100	120	140	160	180
氯乙酸甲酯	705	708	691	697	—	—
氯乙酸氯甲酯	914	903	873	869	—	—
氯乙酸乙酯	802	791	776	774	—	—
氯乙酸-1-氯乙酯	926	911	895	910	—	—
氯乙酸-2-氯乙酯	1016	1002	990	1007	—	-
氯乙酸丙酯	918	907	878	872	870	—
氯乙酸-1-氯丙酯	1032	1027	1001	1011	1006	—
氯乙酸-2-氯丙酯	1069	1066	1044	1954	1053	—
氯乙酸-3-氯丙酯	1134	1138	1118	1130	1128	—
氯乙酸丁酯	—	1007	996	986	986	—
氯乙酸-1-氯丁酯	—	1113	1103	1102	1106	—
氯乙酸-2-氯丁酯	—	1162	1152	1156	1163	—
氯乙酸-3-氯丁酯	—	1182	1174	1178	1181	—
氯乙酸-4-氯丁酯	—	1247	1241	1247	1251	—
氯乙酸戊酯	—	—	1086	1086	1089	1096
氯乙酸-1-氯戊酯	-	-	1194	1198	1202	1203
氯乙酸-2-氯戊酯	—	—	1234	1241	1246	1250
氯乙酸-3-氯戊酯	—	—	1267	1274	1281	1283
氯乙酸-4-氯戊酯	—	—	1282	1289	1295	1297
氯乙酸-5-氯戊酯	—	—	1346	1353	1358	1362

表 17-73 氯乙酸氯代烷基酯保留指数（二）[52]

固定液：OV-351

I 柱温/℃ 化合物	100	120	140	160	180	200
氯乙酸甲酯	1270	1264	1314	1345	1318	1368
氯乙酸氯甲酯	1619	1614	1637	1637	1637	1664
氯乙酸乙酯	1302	1292	1337	1355	1336	1380
氯乙酸-1-氯乙酯	1548	1539	1570	1570	1571	1600
氯乙酸-2-氯乙酯	1759	1755	1789	1787	1792	1803
氯乙酸丙酯	1381	1370	1410	1419	1420	1423
氯乙酸-1-氯丙酯	1606	1599	1634	1630	1631	1649
氯乙酸-2-氯丙酯	1716	1714	1749	1752	1755	1759
氯乙酸-3-氯丙酯	1848	1851	1890	1896	1902	1909
氯乙酸丁酯	1472	1466	1500	1508	1510	1534
氯乙酸-1-氯丁酯	1674	1669	1701	1701	1701	1709
氯乙酸-2-氯丁酯	1793	1792	1829	1830	1840	1844
氯乙酸-3-氯丁酯	1840	1844	1884	1890	1898	1907
氯乙酸-4-氯丁酯	1960	1968	2010	2017	2028	2036
氯乙酸戊酯	—	—	1609	1598	1583	1617
氯乙酸-1-氯戊酯	—		1793	1789	1781	1790
氯乙酸-2-氯戊酯	—		1901	1903	1899	1916
氯乙酸-3-氯戊酯	—		1967	1970	1974	1983
氯乙酸-4-氯戊酯	—	—	2013	2015	2022	2030
氯乙酸-5-氯戊酯	—	—	2115	2120	2131	2138

表 17-74 氯乙酸氯代烷基酯保留指数（三）[52]

固定液	SE-30					OV 351		
I 柱温/℃ 化合物	120	140	160	180	200	160	180	200
氯乙酸己酯	1176	1188	1192	1184	1178	1690	1686	1687
氯乙酸-1-氯己酯	1281	1297	1302	1300	1298	1884	1887	1886
氯乙酸-2-氯己酯	1319	1337	1344	1344	1344	1982	1987	1982
氯乙酸-3-氯己酯	1341	1361	1369	1368	1370	2033	2042	2042
氯乙酸-4-氯己酯	1366	1386	1394	1395	1398	2091	2102	2106
氯乙酸-5-氯己酯	1379	1399	1407	1406	1411	2120	2132	2134
氯乙酸-6-氯己酯	1436	1455	1464	1465	1470	2211	2226	2232
氯乙酸庚酯	—	1297	1293	1276	1275	1785	1788	1797
氯乙酸-1-氯庚酯	—	1400	1399	1393	1395	1967	1974	1976
氯乙酸-2-氯庚酯	—	1438	1440	1433	1435	2071	2082	2086
氯乙酸-3-氯庚酯	—	1460	1462	1458	1460	2122	2134	2140
氯乙酸-4-氯庚酯	—	1476	1479	1476	1479	2162	2176	2181
氯乙酸-5-氯庚酯	—	1500	1503	1499	1503	2203	2218	2225
氯乙酸-6-氯庚酯	—	1506	1509	1505	1508	2220	2237	2244
氯乙酸-7-氯庚酯	—	1559	1563	1563	1564	2308	2325	2333
氯乙酸辛酯	—	1395	1391	1386	1365	1895	1888	1895
氯乙酸-1-氯辛酯	—	1409	1497	1494	1491	2074	2075	2088
氯乙酸-2-氯辛酯	—	1536	1537	1537	1526	2179	2184	2187
氯乙酸-3-氯辛酯	—	1554	1558	1559	1551	2221	2231	2239
氯乙酸-4-氯辛酯	—	1570	1572	1575	1569	2258	2270	2278
氯乙酸-5-氯辛酯	—	1586	1588	1591	1586	2282	2295	2305
氯乙酸-6-氯辛酯	—	1603	1606	1610	1604	2312	2326	2337
氯乙酸-7-氯辛酯	—	1606	1609	1611	1607	2324	2339	2349
氯乙酸-8-氯辛酯	—	1659	1663	1668	1663	2408	2425	2438

表 17-75 二氯乙酸氯代烷基酯保留指数（一）[52]

固定液：OV 351

化合物 \ I \ 柱温/℃	120	140	160	180	200	化合物 \ I \ 柱温/℃	120	140	160	180	200
二氯乙酸甲酯	1361	1387	1365	1362	1391	二氯乙酸-1-氯丁酯	1709	1729	1723	1734	1733
二氯乙酸氯甲酯	1687	1705	1695	1706	1700	二氯乙酸-2-氯丁酯	1858	1885	1885	1896	1898
二氯乙酸乙酯	1384	1404	1396	1400	1423	二氯乙酸-3-氯丁酯	1906	1939	1942	1955	1961
二氯乙酸-1-氯乙酯	1594	1614	1602	1601	1611	二氯乙酸-4-氯丁酯	2014	2076	2083	2097	2106
二氯乙酸-2-氯乙酯	1846	1870	1866	1873	1876	二氯乙酸戊酯	—	1658	1651	1658	1664
二氯乙酸丙酯	1454	1478	1471	1469	1488	二氯乙酸-1-氯戊酯		1815	1810	1813	1815
二氯乙酸-1-氯丙酯	1647	1667	1660	1661	1673	二氯乙酸-2-氯戊酯	—	1952	1950	1958	1961
二氯乙酸-2-氯丙酯	1786	1812	1810	1819	1821	二氯乙酸-3-氯戊酯	—	2014	2017	2031	2036
二氯乙酸-3-氯丙酯	1923	1954	1959	1971	1978	二氯乙酸-4-氯戊酯		2070	2074	2088	2097
二氯乙酸丁酯	1542	1562	1554	1559	1575	二氯乙酸-5-氯戊酯	—	2162	2189	2205	2215

表 17-76 二氯乙酸氯代烷基酯保留指数（二）[52]

固定液	SE-30					OV-351		
化合物 \ I \ 柱温/℃	120	140	160	180	200	160	180	200
二氯乙酸己酯	1260	1270	1270	1270	1273	1749	1751	1759
二氯乙酸-1-氯己酯	1360	1362	1364	1367	1372	1900	1901	1900
二氯乙酸-2-氯己酯	1396	1409	1412	1418	1425	2037	2014	2047
二氯乙酸-3-氯己酯	1416	1433	1438	1445	1451	2085	2098	2105
二氯乙酸-4-氯己酯	1442	1468	1468	1475	1485	2153	2169	2175
二氯乙酸-5-氯己酯	1457	1482	1483	1490	1502	2189	2205	2214
二氯乙酸-6-氯己酯	1509	1535	1541	1550	1557	2281	2300	2312
二氯乙酸庚酯	—	1372	1376	1374	1372	1848	1856	1860
二氯乙酸-1-氯庚酯	—	1462	1468	1469	1471	1999	2004	2021
二氯乙酸-2-氯庚酯		1505	1513	1517	1521	2130	2139	2144
二氯乙酸-3-氯庚酯		1527	1537	1541	1548	2175	2188	2196
二氯乙酸-4-氯庚酯	—	1548	1558	1563	1569	2224	2239	2249
二氯乙酸-5-氯庚酯	—	1576	1586	1591	1599	2273	2290	2300
二氯乙酸-6-氯庚酯	—	1582	1592	1597	1604	2289	2306	2317
二氯乙酸-7-氯庚酯	—	1636	1646	1654	1661	2377	2395	2409
二氯乙酸辛酯	—	1476	1473	1476	1482	1950	1956	1961
二氯乙酸-1-氯辛酯	—	1550	1571	1567	1573	2101	2115	2124
二氯乙酸-2-氯辛酯	—	1602	1608	1614	1621	2224	2235	2239
二氯乙酸-3-氯辛酯	—	1623	1629	1637	1645	2266	2281	2291
二氯乙酸-4-氯辛酯		1641	1648	1657	1665	2311	2328	2338
二氯乙酸-5-氯辛酯	—	1661	1667	1677	1685	2343	2361	2371
二氯乙酸-6-氯辛酯	—	1678	1685	1695	1704	2372	2391	2403
二氯乙酸-7-氯辛酯	—	1682	1689	1699	1706	2384	2404	2416
二氯乙酸-8-氯辛酯		1736	1771	1754	1761	2470	2491	2506

表 17-77 二氯乙酸氯代烷基酯保留指数（三）[52]

固定液：SE-30

I 柱温/℃ 化合物	80	100	120	140	160	180
二氯乙酸甲酯	821	808	791	785	—	—
二氯乙酸氯甲酯	976	960	926	962	—	—
二氯乙酸乙酯	887	871	872	869	—	—
二氯乙酸-1-氯乙酯	994	980	979	985		
二氯乙酸-2-氯乙酯	1094	1083	1083	1094	—	—
二氯乙酸丙酯	979	964	934	969	969	—
二氯乙酸-1-氯丙酯	1081	1071	1040	1084	1084	—
二氯乙酸-2-氯丙酯	1127	1117	1089	1133	1132	—
二氯乙酸-3-氯丙酯	1197	1190	1163	1209	1212	—
二氯乙酸丁酯	—	1061	1061	1072	1070	—
二氯乙酸-1-氯丁酯	—	1156	1159	1172	1173	—
二氯乙酸-2-氯丁酯	—	1211	1214	1229	1235	—
二氯乙酸-3-氯丁酯	—	1231	1236	1252	1257	—
二氯乙酸-4-氯丁酯	—	1302	1308	1325	1332	—
二氯乙酸戊酯	—	—	1129	1167	1173	1172
二氯乙酸-1-氯戊酯	—	—	1222	1263	1272	1271
二氯乙酸-2-氯戊酯	—	—	1268	1313	1322	1324
二氯乙酸-3-氯戊酯	—	—	1300	1347	1356	1360
二氯乙酸-4-氯戊酯	—	—	1318	1367	1374	1378
二氯乙酸-5-氯戊酯	—	—	1385	1432	1440	1446

表 17-78 三氯乙酸氯代烷基酯保留指数（一）[52]

固定液：SE-30

I 柱温/℃ 化合物	80	100	120	140	160	180
三氯乙酸甲酯	884	875	867	876	—	—
三氯乙酸氯甲酯	1031	1021	1012	1038	—	—
三氯乙酸乙酯	955	944	930	949	—	—
三氯乙酸-1-氯乙酯	1048	1036	1023	1050	—	—
三氯乙酸-2-氯乙酯	1152	1148	1139	1172	—	—
三氯乙酸丙酯	1044	1034	1026	1057	1066	—
三氯乙酸-1-氯丙酯	1129	1123	1117	1154	1163	—
三氯乙酸-2-氯丙酯	1180	1176	1172	1210	1217	—
三氯乙酸-3-氯丙酯	1252	1251	1249	1288	1294	—
三氯乙酸丁酯	—	1127	1117	1148	1156	—
三氯乙酸-1-氯丁酯	—	1208	1201	1237	1244	—
三氯乙酸-2-氯丁酯	—	1268	1264	1301	1311	—
三氯乙酸-3-氯丁酯	—	1291	1289	1326	1337	—
三氯乙酸-4-氯丁酯	—	1364	1365	1403	1413	—
三氯乙酸戊酯	—	—	1216	1252	1256	1256
三氯乙酸-1-氯戊酯	—	—	1296	1333	1338	1338
三氯乙酸-2-氯戊酯	—	—	1348	1387	1393	1398
三氯乙酸-3-氯戊酯		—	1382	1423	1430	1437
三氯乙酸-4-氯戊酯		—	1404	1444	1451	1459
三氯乙酸-5-氯戊酯	—	—	1474	1513	1523	1530

表 17-79　三氯乙酸氯代烷基酯保留指数（二）[32]

固定液：OV-351

化合物 \ I \ 柱温/℃	120	140	160	180	200	化合物 \ I \ 柱温/℃	120	140	160	180	200
三氯乙酸甲酯	1387	1378	1387	1392	1443	三氯乙酸-1-氯丁酯	1647	1650	1657	1661	1678
三氯乙酸氯甲酯	1654	1653	1657	1661	1678	三氯乙酸-2-氯丁酯	1828	1846	1851	1859	1873
三氯乙酸乙酯	1400	1390	1396	1392	1443	三氯乙酸-3-氯丁酯	1875	1900	1911	1923	1941
三氯乙酸-1-氯乙酯	1547	1545	1550	1554	1587	三氯乙酸-4-氯丁酯	2023	2050	2061	2079	2093
三氯乙酸-2-氯乙酯	1836	1849	1852	1859	1873	三氯乙酸戊酯	—	1634	1630	1631	1668
三氯乙酸丙酯	1466	1459	1471	1463	1512	三氯乙酸-1-氯戊酯	—	1733	1729	1736	1756
三氯乙酸-1-氯丙酯	1590	1591	1598	1611	1628	三氯乙酸-2-氯戊酯	—	1905	1908	1920	1935
三氯乙酸-2-氯丙酯	1765	1778	1784	1794	1809	三氯乙酸-3-氯戊酯	—	1969	1978	1993	2015
三氯乙酸-3-氯丙酯	1895	1921	1931	1944	1961	三氯乙酸-4-氯戊酯	—	2034	2046	2061	2078
三氯乙酸丁酯	1542	1543	1550	1554	1587	三氯乙酸-5-氯戊酯	—	2155	2170	2188	2205

表 17-80　三氯乙酸氯代烷基酯保留指数（三）[32]

固定液	SE-30					OV-351		
化合物 \ I \ 柱温/℃	120	140	160	180	200	160	180	200
三氯乙酸己酯	1315	1350	1358	1361	1367	1726	1734	1766
三氯乙酸-1-氯己酯	1393	1429	1436	1442	1447	1821	1829	1844
三氯乙酸-2-氯己酯	1442	1480	1488	1498	1503	1992	2006	2026
三氯乙酸-3-氯己酯	1467	1505	1516	1525	1532	2042	2061	2083
三氯乙酸-4-氯己酯	1498	1537	1549	1558	1566	2119	2141	2159
三氯乙酸-5-氯己酯	1518	1557	1568	1575	1585	2164	2186	2205
三氯乙酸-6-氯己酯	1576	1614	1625	1638	1645	2258	2281	2300
三氯乙酸庚酯	—	1453	1455	1459	1463	1826	1831	1850
三氯乙酸-1-氯庚酯	—	1527	1533	1538	1546	1915	1923	1935
三氯乙酸-2-氯庚酯	—	1575	1583	1592	1600	2085	2095	2108
三氯乙酸-3-氯庚酯	—	1599	1609	1618	1628	2132	2148	2162
三氯乙酸-4-氯庚酯	—	1622	1632	1642	1652	2191	2209	2223
三氯乙酸-5-氯庚酯	—	1652	1664	1673	1681	2249	2267	2284
三氯乙酸-6-氯庚酯	—	1659	1669	1679	1688	2266	2285	2301
三氯乙酸-7-氯庚酯	—	1714	1726	1736	1745	2354	2375	2393
三氯乙酸辛酯	—	1549	1557	1562	1564	1922	1934	1949
三氯乙酸-1-氯辛酯	—	1624	1632	1637	1645	2023	2042	2057
三氯乙酸-2-氯辛酯	—	1670	1681	1690	1698	2176	2193	2218
三氯乙酸-3-氯辛酯	—	1693	1705	1714	1724	2219	2241	2256
三氯乙酸-4-氯辛酯	—	1713	1726	1736	1746	2275	2296	2313
三氯乙酸-5-氯辛酯	—	1736	1748	1760	1770	2315	2338	2355
三氯乙酸-6-氯辛酯	—	1753	1766	1778	1789	2345	2369	2387
三氯乙酸-7-氯辛酯		1757	1770	1782	1793	2358	2382	2401
三氯乙酸-8-氯辛酯	—	1812	1826	1838	1845	2446	2472	2491

表 17-81 苯甲酸氯乙酯与氯苯甲酸氯乙酯的保留指数[illegible]

固定液	SE-30			OV-351			
化合物 \ I \ 柱温/℃	140	160	180	160	180	200	220
苯甲酸乙酯	1166	1157	1176	1695	1704	1700	1692
苯甲酸-2-氯乙酯	1375	1380	1396	2123	2146	2165	2179
苯甲酸-2,2-二氯乙酯	1462	1470	1485	2213	2237	2258	2273
苯甲酸-2,2,2-三氯乙酯	1526	1536	1552	2184	2210	2232	2250
邻氯苯甲酸乙酯	1322	1325	1341	1965	1986	2009	2018
邻氯苯甲酸-2-氯乙酯	1538	1549	1559	2398	2425	2449	2468
邻氯苯甲酸-2,2-二氯乙酯	1628	1638	1653	2491	2520	2544	2565
邻氯苯甲酸-2,2,2-三氯乙酯	1697	1708	1726	2469	2501	2528	2552
间氯苯甲酸乙酯	1317	1318	1335	1884	1901	1920	1935
间氯苯甲酸-2-氯乙酯	1535	1542	1555	2331	2359	2379	2398
间氯苯甲酸-2,2-二氯乙酯	1618	1627	1643	2421	2448	2470	2491
间氯苯甲酸-2,2,2-三氯乙酯	1678	1690	1705	2366	2397	2420	2441
对氯苯甲酸乙酯	1318	1323	1336	1878	1899	1921	1939
对氯苯甲酸-2-氯乙酯	1536	1544	1558	2325	2354	2378	2396
对氯苯甲酸-2,2-二氯乙酯	1622	1635	1647	2419	2448	2472	2494
对氯苯甲酸-2,2,2-三氯乙酯	1683	1696	1711	2372	2404	2430	2454

第三节 多种卤素化合物的保留指数

表 17-82 氟代醇保留指数[67]

固定液	聚二甲基硅氧烷				聚氰基丙基甲基硅氧烷			
柱温/℃	160	170	180	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	140	150	160	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
化合物 \ 保留指数	I				I			
1*H*,1*H*,3*H*-四氟-1-丙醇	650.9	640.2	636.1	−7.40	931.3	923.2	912.1	−9.60
1*H*,1*H*,5*H*-八氟-1-戊醇	759.4	748.5	742.9	−8.25	1032.8	1021.4	1009.3	−11.75
1*H*,1*H*,7*H*-十二氟-1-庚醇	867.8	856.8	849.7	−9.05	1134.2	1120.0	1106.0	−14.10
1*H*,1*H*,9*H*-十六氟-1-壬醇	976.3	965.1	956.5	−9.90	1235.5	1218.3	1202.7	−16.40
1*H*,1*H*,11*H*-二十氟-1-十一醇	1084.8	1073.4	1065.3	−10.75	1336.6	1316.4	1299.0	−18.80
1*H*,1*H*,13*H*-二十四氟-1-十三醇	1193.2	1181.7	1170.2	−11.50	1438.0	1414.7	1396.0	−21.00
1*H*,1*H*,15*H*-二十八氟-1-十五醇	1301.5	1290.0	1276.9	12.35	1539.5	1513.3	1493.0	−23.25
1*H*,1*H*,17*H*-三十二氟-1-十七醇	1410.0	1383.7	1383.7	−13.15	1640.3	1611.5	1589.8	−25.50

表 17-83 氯代乙醇保留指数 (一)[49]

固定液：SE-30

化合物 \ I \ 柱温/℃	80	100	120	140	160	180
乙醇	443	427	411	415	411	406
2-氯乙醇	629	638	606	600	602	607
2,2-二氯乙醇	690	694	678	665	672	683
2,2,2-三氯乙醇	711	750	734	721	736	775

表 17-84　氯代乙醇保留指数（二）[40]

固定液：OV-351

I 柱温/℃ 化合物	100	120	140	160	180
乙醇	927	910	890	867	860
2-氯乙醇	1372	1378	1385	1394	1396
2,2-二氯乙醇	1594	1601	1609	1616	1623
2,2,2-三氯乙醇	1693	1698	1704	1707	1713

表 17-85　氯代酚保留指数（一）[58]

柱温：160℃

I 固定液 化合物	SE-30	FFAP	I 固定液 化合物	SE-30	FFAP	I 固定液 化合物	SE-30	FFAP
苯酚	929	2000	2,6-二氯酚	1200	2097	2,4,6-三氯酚	1346	2301
2-氯酚	991	1866	3,4-二氯酚	1378	2731	3,4,5-三氯酚	1587	3028
3-氯酚	1157	2371	3,5-二氯酚	1375	2675	2,3,4,5-四氯酚	1536	2730
4-氯酚	1157	2371	2,3,4-三氯酚	1363	2453	2,3,4,6-四氯酚	1538	2554
2,3-二氯酚	1180	2160	2,3,5-三氯酚	1327	2403	2,3,5,6-四氯酚	1530	2553
2,4-二氯酚	1170	2151	2,3,6-三氯酚	1354	2368	2,3,4,5,6-五氯酚	1720	2821
2,5-二氯酚	1170	2160	2,4,5-三氯酚	1356	2458			

表 17-86　氯代酚保留指数（二）[133]

固定液	SE-30			FFAP		
I 柱温/℃ 化合物	140	160	180	160	180	200
苯酚	943	929	932	2000	1971	1957
2-氯酚	987	991	1000	1866	1812	1800
3-氯酚	1159	1157	1161	2371	2371	2380
4-氯酚	1158	1157	1161	2371	2371	2380
2,3-二氯酚	1169	1180	1188	2160	2143	2152
2,4-二氯酚	1160	1170	1181	215	2131	2145
2,5-二氯酚	1162	1170	1181	2160	2143	2152
2,6-二氯酚	1189	1200	1214	2097	2081	2083
3,4-二氯酚	1374	1378	1384	2731	2752	2777
3,5-二氯酚	1358	1375	1392	2675	2691	2713
2,3,4-三氯酚	1345	1363	1380	2453	2460	2476
2,3,5-三氯酚	1317	1327	1347	2403	2403	2410
2,3,6-三氯酚	1352	1354	1359	2368	2361	2376
2,4,5-三氯酚	1338	1356	1370	2453	2460	2476
2,4,6-三氯酚	1331	1346	1360	2301	2306	2321
3,4,5-三氯酚	1584	1587	1595	3028	3075	3112
2,3,4,5-四氯酚	1517	1536	1558	2730	2751	2776
2,3,4,6-四氯酚	1519	1538	1559	2554	2573	2615
2,3,5,6-四氯酚	1511	1530	1551	2553	2573	2615
五氯酚	1700	1720	1743	2821	2848	2885

表 17-87 苯乙酮衍生物保留指数[63]

柱温：160℃

I 固定液 / 化合物	OV 101	OV-3	OV-7	OV-11	OV 17	OV 22	OV 25
苯乙酮	1066.1	1117.4	1162.5	1216.3	1264.7	1336.6	1364.4
对甲基苯乙酮	1181.7	1235.3	1278.6	1335.0	1382.4	1441.1	1483.2
间甲基苯乙酮	1168.9	1221.5	1265.4	1318.5	1369.7	1439.8	1468.1
邻甲基苯乙酮	1133.7	1184.1	1226.4	1278.2	1329.0	1397.0	1425.7
对甲氧基苯乙酮	1333.4	1402.2	1456.6	1526.5	1587.6	1652.9	1712.1
对氯苯乙酮	1226.3	1285.5	1335.6	1395.6	1445.2	1497.9	1549.3
邻氯苯乙酮	1193.8	1251.1	1299.0	1355.2	1411.0	1480.5	1517.1
对氟苯乙酮	1047.6	1105.5	1143.8	1198.2	1239.6	1298.9	1324.7
邻氟苯乙酮	1026.4	1073.4	1113.0	1159.8	1205.5	1272.5	1278.5
对羟基苯乙酮	1398.2	1490.7	1542.7	1618.3	1700.4	1782.3	1812.1
间羟基苯乙酮	1358.1	1438.5	1499.1	1569.8	1650.9	1738.6	1749.9
邻羟基苯乙酮	1162.7	1218.8	1265.1	1319.4	1372.4	1440.6	1470.5
对溴苯乙酮	1315.1	1381.6	1433.3	1498.8	1554.6	1616.1	1666.1
间溴苯乙酮	1310.4	1375.5	1428.0	1490.8	1550.5	1608.3	1662.9
间硝基苯乙酮	1410.8	1506.1	1568.2	1645.3	1723.3	1759.4	1811.3
邻硝基苯乙酮	1361.3	1456.5	1514.5	1591.1	1676.2	1713.4	1774.8

表 17-88 氯代水杨醛保留指数[32]

固定液	SE 30			OV 351		
I 柱温/℃ / 化合物	140	160	180	140	160	180
水杨醛	1044	1062	1074	1751	1742	1699
3 氯水杨醛	1249	1264	1278	2066	2082	2112
4-氯水杨醛	1186	1201	1216	1834	1879	1814
5-氯水杨醛	1190	1206	1217	1965	1966	1969
6-氯水杨醛	1200	1214	1224	1944	1947	1948
3,4-二氯水杨醛	1413	1434	1451	2374	2426	2517
3,5-二氯水杨醛	1370	1388	1403	2272	2314	2399
3,6-二氯水杨醛	1368	1387	1403	2130	2160	2243
4,5-二氯水杨醛	1342	1358	1376	2020	2036	2054
4,6-二氯水杨醛	1311	1326	1344	1948	1957	1977
5,6-二氯水杨醛	1358	1376	1392	2179	2193	2251
3,4,5-三氯水杨醛	1557	1577	1598	—		-
3,4,6-三氯水杨醛	1508	1529	1549		-	-
3,5,6-三氯水杨醛	1503	1522	1543	—	—	—
4,5,6-三氯水杨醛	1489	1510	1530	—	—	—
四氯水杨醛	1681	1722	1737	—	—	—

表 17-89 氯代-4-羟基苯甲醛保留指数[34]

固定液：SE-30

I 柱温/℃ / 化合物	160	180	200	I 柱温/℃ / 化合物	160	180	200
苯酚	964	924	—	2,5-二氯-4-羟基苯甲醛	1449	1459	1464
苯甲醛	978	941	—	2,6-二氯-4-羟基苯甲醛	1753	1750	1749
4-羟基苯甲醛	1320	1318	1302	3,5-二氯-4-羟基苯甲醛	1465	1476	1479
2-氯-4-羟基苯甲醛	1524	1520	1514	2,3,5-三氯-4-羟基苯甲醛	1632	1644	1653
3-氯-4-羟基苯甲醛	1291	1301	1291	2,3,6-三氯-4-羟基苯甲醛	1651	1664	1675
2,3-二氯-4-羟基苯甲醛	1463	1474	1479	四氯-4-羟基苯甲醛	1820	1839	1855

表 17-90　氯代羟基苯甲醛保留指数[58]

柱温：160℃

I 固定液 / 化合物	SE-30	OV-351	I 固定液 / 化合物	SE-30	OV-351
苯甲醛	978		5-氯-2-羟基苯甲醛	1206	1966
4-羟基苯甲醛	1320	—	6-氯-2-羟基苯甲醛	1214	1947
2-氯-4-羟基苯甲醛	1524	—	3,4-二氯-2-羟基苯甲醛	1434	2426
3-氯-4-羟基苯甲醛	1291		3,5-二氯-2-羟基苯甲醛	1388	2314
2,3-二氯-4-羟基苯甲醛	1463	—	3,6-二氯-2-羟基苯甲醛	1387	2160
2,5-二氯-4-羟基苯甲醛	1449		4,5-二氯-2-羟基苯甲醛	1358	2036
2,6-二氯-4-羟基苯甲醛	1753	—	4,6-二氯-2-羟基苯甲醛	1326	1957
3,5-二氯-4-羟基苯甲醛	1465	—	5,6-二氯-2-羟基苯甲醛	1376	2193
2,3,5-三氯-4-羟基苯甲醛	1632	—	3,4,5-三氯-2-羟基苯甲醛	1577	—
2,3,6-三氯-4-羟基苯甲醛	1651	—	3,4,6-三氯-2-羟基苯甲醛	1529	—
四氯-4-羟基苯甲醛	1820	—	3,5,6-三氯-2-羟基苯甲醛	1522	—
2-羟基苯甲醛	1062	1742	4,5,6-三氯-2-羟基苯甲醛	1510	
3-氯-2-羟基苯甲醛	1264	2082	四氯-2-羟基苯甲醛	1722	-
4-氯-2-羟基苯甲醛	1201	1829			

表 17-91　苯甲醛衍生物保留指数[63]

柱温：160℃

I 固定液 / 化合物	OV-101	OV-3	OV-7	OV-11	OV-17	OV-22	OV-25
苯甲醛	964.4	1015.7	1081.9	1115.9	1152.7	1203.1	1249.3
对甲基苯甲醛	1083.6	1137.4	1199.7	1234.4	1274.8	1320.4	1367.8
间甲基苯甲醛	1070.4	1122.4	1185.9	1216.0	1252.1	1300.3	1348.9
邻甲基苯甲醛	1070.9	1125.2	1190.1	1221.7	1257.6	1311.0	1361.4
对甲氧基苯甲醛	1239.6	1309.3	1381.5	1430.0	1485.2	1537.0	1597.7
间甲氧基苯甲醛	1187.8	1251.8	1321.9	1364.2	1411.7	1462.0	1521.9
邻甲氧基苯甲醛	1227.9	1292.7	1367.8	1408.8	1456.5	1509.8	1576.1
对乙氧基苯甲醛	1310.6	—	1451.7	1489.0	1543.6	1596.8	1652.0
邻乙氧基苯甲醛	1286.4	1349.8	1418.4	1457.3	1502.0	1549.6	1606.1
对氯苯甲醛	1122.6	1185.6	1252.8	1292.0	1336.8	1383.0	1433.5
间氯苯甲醛	1118.9	1180.3	1246.4	1283.0	1523.3	1370.1	1423.2
邻氯苯甲醛	1122.4	1179.8	1244.4	1277.2	1317.8	1366.4	1417.3
对氟苯甲醛	948.3	997.4	1069.9	1102.3	1135.5	1183.1	1219.0
间氟苯甲醛	939.1	989.9	1057.2	1086.2	1107.7	1160.3	1200.1
邻氟苯甲醛	947.3	996.3	1061.1	1085.4	1109.4	1167.9	1201.5
对溴苯甲醛	1216.5	1274.6	1349.3	1392.8	1446.6	1494.0	1570.7
间溴苯甲醛	1207.8	1269.1	1344.2	1384.8	1436.0	1483.7	1552.6
邻溴苯甲醛	1211.6	1261.8	1340.4	1377.5	1428.0	1479.1	1544.0
对羟基苯甲醛	1320.8	—	1458.9	1531.8	1596.2	1658.9	1729.5
间羟基苯甲醛	1267.0	—	1401.1	1468.0	1528.9	1582.8	1652.3
邻羟基苯甲醛	1047.6	—	1167.7	1199.1	1234.7	1289.9	1338.1
对硝基苯甲醛	1302.2	—	1481.9	1511.5	1609.0	1662.1	1721.9
间硝基苯甲醛	1314.5	—	1482.9	1556.3	1621.7	1671.7	1734.4
邻硝基苯甲醛	1277.0	—	1446.8	1496.2	1560.2	1611.1	1674.2

表 17-92　氯代苯甲醚保留指数[31]

固定液	SE 30			OV-351		
I 柱温/℃ 化合物	140	160	180	140	160	180
苯甲醚	887	880	900	1375	1373	1331
2-氯苯甲醚	1097	1099	1108	1689	1690	1684
3-氯苯甲醚	1080	1085	1092	1623	1628	1618
4-氯苯甲醚	1090	1094	1108	1648	1656	1645
2,3-二氯苯甲醚	1298	1309	1322	1957	1977	1985
2,4-二氯苯甲醚	1265	1272	1282	1885	1905	1902
2,5-二氯苯甲醚	1256	1261	1273	1874	1892	1886
2,6-二氯苯甲醚	1190	1198	1215	1720	1732	1733
3,4-二氯苯甲醚	1275	1285	1298	1878	1899	1900
3,5-二氯苯甲醚	1236	1243	1254	1780	1800	1798
2,3,4-三氯苯甲醚	1476	1488	1501	2182	2204	2225
2,3,5-三氯苯甲醚	1428	1437	1452	2067	2085	2098
2,3,6-三氯苯甲醚	1358	1371	1388	1918	1943	1952
2,4,5-三氯苯甲醚	1423	1433	1447	2061	2080	2097
2,4,6-三氯苯甲醚	1319	1333	1350	1813	1837	1842
3,4,5-三氯苯甲醚	1441	1451	1470	2061	2080	2097
2,3,4,5-四氯苯甲醚	1618	1633	1649	2319	2340	2367
2,3,4,6-四氯苯甲醚	1506	1520	1538	2044	2071	2094
2,3,5,6-四氯苯甲醚	1504	1518	1536	2044	2071	2094
五氯苯甲醚	1681	1699	1721	2245	2279	2313

表 17-93　硝基氯苯与氯苯胺保留指数[59]

柱温：170℃

I 固定液 化合物	二苯并-18-冠-6	二苯并-24-冠-8	二环己-24-冠-8	I 固定液 化合物	二苯并-18-冠-6	二苯并-24-冠-8	二环己-24-冠-8
邻硝基氯苯	1983	1968	1728	邻氯苯胺	1835	1828	1640
间硝基氯苯	1918	1892	1661	间氯苯胺	2010	2011	1801
对硝基氯苯	1949	1927	1682	对氯苯胺	2005	2011	1796

表 17-94　溴代甲氧基烷烃保留指数[11]

柱温：115℃

I 固定液 化合物	角鲨烷	TCEP+SP80	nNT①	Carbowax 1500	I 固定液 化合物	角鲨烷	TCEP+SP80	nNT①	Carbowax 1500
1-甲氧基己烷	695	1078	885	969	1,2-二溴己烷	1129	1627	1319	1538
1-甲氧基庚烷	798	1165	986	1071	苏-2,3-二溴丁烷	930	1491	1124	1348
1-溴丁烷	715	1118	846	986	赤-2,3-二溴丁烷	916	1473	1109	1329
1-溴己烷	918	1287	1049	1187	苏-2,3-二溴戊烷	1018	1553	1204	1425
1-溴庚烷	1018	1367	1149	1287	赤-2,3-二溴戊烷	1011	1527	1168	1400
1-溴辛烷	1119	1447	1249	1388	苏-2,3-二溴己烷	1102	1597	1279	1490
1-溴壬烷	1220	1526	--	1488	赤-2,3-二溴己烷	1095	1581	1268	1474
1,1-二甲氧基甲烷	500	984	631	764	1-溴-2-甲氧基乙烷	696	1362	921	1142
1,1-二甲氧基乙烷	563	1029	689	824	1-溴-2-甲氧基丙烷	754	1368	958	1160
1,1-二甲氧基己烷	929	1325	1065	1189	2-溴-1-甲氧基丙烷	742	1322	933	1122
1,1-二甲氧基庚烷	1029	1403	1164	1288	1-溴-2-甲氧基丁烷	846	1415	1038	1231
1,2-二溴乙烷	791	1460	1045	1303	2-溴-1-甲氧基丁烷	844	1393	1027	1213
1,2-二溴丙烷	846	1441	1059	1291	1-溴-2-甲氧基戊烷	936	1478	1125	1311
1,2-二溴丁烷	943	1507	1147	1373	2-溴-1-甲氧基戊烷	935	1455	1113	1294
1,2-二溴戊烷	1033	1562	1227	1447	1-溴-2-甲氧基己烷	1032	1548	1221	1408

续表

I 固定液 / 化合物	角鲨烷	TCEP+SP80	nNT①	Carbowax 1500	I 固定液 / 化合物	角鲨烷	TCEP+SP80	nNT①	Carbowax 1500
2-溴-1-甲氧基己烷	1028	1524	1207	1386	赤-3-溴-2-甲氧基戊烷	914	1448	1088	1270
苏-2-溴-3-甲氧基丁烷	823	1372	1002	1185	苏-2-溴-3-甲氧基己烷	990	1474	1157	1327
赤-2-溴-3-甲氧基丁烷	818	1381	1000	1187	苏-3-溴-2-甲氧基己烷	1000	1484	1165	1338
苏-2-溴-3-甲氧基戊烷	906	1427	1078	1254	赤-2-溴-3-甲氧基己烷	991	1471	1156	1325
苏-3-溴-2-甲氧基戊烷	916	1435	1087	1266	赤-3-溴-2-甲氧基己烷	999	1506	1171	1349
赤-2-溴-3-甲氧基戊烷	903	1405	1068	1240					

①固定液 nNT 为 n nonoxa-5,8,11,14,16,20,23,26,29-tritri-acontane。

表 17-95 氯代二甲氧基苯保留指数[15]

固定液	SE-30				OV-351			
I 柱温/°C / 化合物	140	160	180	200	140	160	180	200
邻二甲氧基苯	1131	1114	1121	1128	1699	1703	1718	1752
3-氯邻二甲氧基苯	1266	1262	1263	1281	1847	1863	1883	1915
4-氯邻二甲氧基苯	1307	1301	1300	1318	1951	1959	1975	1994
3,4-二氯邻二甲氧基苯	1418	1451	1455	1477	2108	2127	2150	2171
3,5-二氯邻二甲氧基苯	1410	1412	1414	1436	2009	2025	2045	2067
3,6-二氯邻二甲氧基苯	1340	1343	1348	1371	1864	1886	1916	1941
4,5-二氯邻二甲氧基苯	1484	1483	1484	1503	2188	2203	2216	2228
3,4,5-三氯邻二甲氧基苯	1606	1613	1622	1640	2287	2312	2332	2351
3,4,6-三氯邻二甲氧基苯	1497	1503	1511	1536	2034	2060	2088	2119
四氯邻二甲氧基苯	1677	1690	1705	1724	2265	2301	2331	2359

表 17-96 氯丁二烯及杂质的保留指数[10]

固定液：邻苯二甲酸二丁酯　　柱温：10℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
氯乙烯	479	己烷	600	二乙烯基乙炔	762
氯乙炔	504	二乙炔	647	1,4-二氯丁烷	771
乙醛	536	甲基环戊烷	661	甲基乙烯基酮	772
2-氯丙烯	564	氯丁二烯	708	1-氯-2-丁烯	786
2-甲基戊烷	574	3-氯-1-丁烯	705	4-氯-1,2-丁二烯	806
2,3-二甲基丁烷	574	2,2-二氯-1-丁烯	723	1,1-二氯乙烷	814
3-甲基戊烷	589	1-氯-1,3-丁二烯	733	2,3-二氯-1,3-丁二烯	839

表 17-97 苯衍生物保留指数[63]

柱温：120℃

I 固定液 / 化合物	OV-101	OV-3	OV-7	OV-11	OV-17	OV-22	OV-25
苯	669.9	689.8	711.4	737.8	763.8	784.2	812.0
氟苯	673.9	697.9	720.9	740.5	780.1	785.4	817.2
甲苯	771.6	792.8	815.7	845.4	872.0	892.8	916.3
氯苯	850.3	886.6	908.1	941.1	987.2	995.3	1026.2
苯甲醚	910.1	945.4	979.7	1019.9	1074.8	1087.2	1122.6
溴苯	934.8	973.7	1001.8	1039.9	1080.7	1100.5	1138.1
苯甲醛	950.7	1005.5	1043.5	1094.1	1134.3	1168.4	1206.8
苯酚	952.5	1014.4	1029.0	1076.4	1127.0	1148.4	1189.7
苯乙酮	980.5	1032.0	1046.8	1085.9	1144.1	1151.0	1199.7
硝基苯	1013.1	1109.1	1152.2	1199.7	1234.6	1269.7	1325.6
	1068.5	1133.3	1177.0	1231.0	1291.4	1308.3	1351.2

表 17-98　多氯联苯保留指数（一）[18]

固定液：OV-101　　柱温：200℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
2,2'-二氯联苯	1621.6	2,3',5-三氯联苯	1839.2	2,2',4,4'-四氯联苯	1932.7
2,3'-二氯联苯	1686.0	2,3',4-三氯联苯	1844.2	2,2',3,5'-四氯联苯	1953.0
2,4'-二氯联苯	1636.9	2,4,4'-三氯联苯	1856.7	2,2',3,4'-四氯联苯	1958.5
2,2',6-三氯联苯	1731.8	2',3,4-三氯联苯	1873.2	2,2',3,3'-四氯联苯	1987.4
2,2',5-三氯联苯	1772.2	2,2',5,5'-四氯联苯	1918.3	2,3',4',5-四氯联苯	2025.9
2,2',3-三氯联苯	1805.8	2,2',4,5'-四氯联苯	1926.6	2,4',5-三氯联苯	1853.3

表 17-99　多氯联苯保留指数（二）[18]

固定液：Apiezon L　　柱温：200℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
联苯	1452.6	2,4'-二氯联苯	1747.2	2,4,2',5'-四氯联苯	1981.0
2-氯联苯	1546.4	2,5,2'-三氯联苯	1808.2	2,3,2',5'-四氯联苯	1988.9
4-甲基联苯	1565.3	2,3,2'-三氯联苯	1825.0	2,4,2',4'-四氯联苯	1997.8
3-乙基联苯	1628.1	3,3'-二氯联苯	1833.8	3,5-二氯-3'-异丙基联苯	2019.3
2,2'-二氯联苯	1639.0	2,6,4'-三氯联苯	1843.3	3,4,3'-三氯联苯	2037.3
2,6-二氯联苯	1639.0	4,4'-二氯联苯	1857.9	3,4,4'-三氯联苯	2051.8
3,3'-二甲基联苯	1642.6	3,5'-二氯联苯	1868.4	3,4-二氯-3'-异丙基联苯	2053.0
4-氯联苯	1652.4	2,5,2',6'-四氯联苯	1890.4	3,5-二氯-4'-异丙基联苯	2068.6
3-异丙基联苯	1666.1	3,5,2'-三氯联苯	1902.6	3,5,4'-三异丙基联苯	2071.5
4-异丙基联苯	1709.0	2,5,4'-三氯联苯	1911.0	2,3,3',5'-四氯联苯	2087.0
2,5-二氯联苯	1718.5	2,4,4'-三氯联苯	1923.0	2,5,3',4'-四氯联苯	2103.9
2,4-二氯联苯	1725.8	2,3,4'-三氯联苯	1931.9	2,3,4,3'-四氯联苯	2108.4
2,3-二氯联苯	1730.1	4,4'-二异丙基联苯	1963.2	2,4,3',4'-四氯联苯	2114.1
2,6,2'-三氯联苯	1739.6	2,5',2',5'-四氯联苯	1966.4	2,3,3',4'-四氯联苯	2122.0

表 17-100　含卤素化合物保留指数[21]

柱温：120℃

I　　固定液 化合物	Zonyl E 7	PEG 1540	三氰基乙氧基丙烷	聚苯醚六环	DEGS
1-氯辛烷	1090	1050	1237	972	1139
1,1-二氟四氯乙烷	890	889	1015	784	976
1,2-二氟四氯乙烷	899	898	1029	790	991
氯仿	773	1029	1240	775	1157
四氯化碳	788	907	1047	796	1015
1,2-二氯乙烷	863	1081	1398	834	1255
三氯乙烯	862	1025	1210	859	1154
1,1,2,2-四氯乙烷	1151	1495	1859	1160	1741
六氯丁二烯	1363	1522	1735	1376	1713
α-氯甲苯	1333	1542	1978	1273	1807
1-氯己烷	1008	1065	1266	968	1171
1,2-二氯苯	1317	1523	1862	1279	1749
顺-2-氯代异丙基醚	1367	1512	1941	1273	1764
2-氯酚	1367	1835	2274	1270	2120
溴乙烷	677	795	1012	665	914
1-溴丙烷	984	1081	1300	973	1199
2-溴辛烷	1242	1320	1523	1214	1418
碘甲烷	645	844	1056	698	967
1-碘丁烷	954	1111	1340	989	1234
2-碘丁烷	926	1054	1275	946	1178

参 考 文 献

1 Karasek F W. J Chrom Sci,1970;8:282

2 Karasek F W,Fong I. J Chrom Sci,1971;9:497

3 Karasek F W,Vassilakopulos P. Chromatographia,1971;4:388

4 Головин Р В, Арсеньев Ю Н. Изв АН СССР Сер Хим,1971;1110

5 Bayer F L,Goodly P C,Gordon M. J Chrom Sci,1972;10:698

6 Karasek F W,Grimard A I,Deelstra B L. J Chrom Sci, 1972;10:725

7 Karasek F W,Stepanik T. J Chrom Sci,1972;10:573

8 Bayer F L,Goodley P C. J Chrom Sci,1973;11:443

9 Rogers R R,Bom G S,Kessler W V,et al. Anal Chem,1973;45:568

10 Volek J,Hrivnak J,Sojak L. Ropa Uhile,1973;15:378

11 Lafosse M,Thuaud Chourrout N. Chromatographia,1975;8;195

12 West S D,Hall R C. J Chrom Sci,1975;13:5

13 Krupcik J,Kristin M,Valachovicova M,et al. J Chromatogr,1976;126:147

14 Riedo F,Fritz D,Tarjan G. J Chromatogr,1976;126:63

15 Скобелева В Д,Шевченко Н А. Ж А Х,1976;31:1551

16 De Beer J,Van Peteghem C,Heyndrickx A. J Chromatogr,1978;157:97

17 Muller U,Dietrich P,Prescher D. J Chromatogr,1978;147:31

18 Krupaik J,Leclercq P A,Garaj J,et al. J Chromatogr,1980;191:207

19 De Beer J O,Heyndrickx A M. J Chromatogr,1982;253:337

20 Komarek K,Homova L,Churcek J. J Chromatogr,1982;244:142

21 Patte F,Etcheto M,Laffort L. Anal Chem,1982;54:2239

22 Haken J K,Korhonen I O O. J Chromatogr,1983;257:267

23 Haken J K,Korhonen I O O. J Chromatogr,1983;265:323

24 Haken J K,Madden B G,Korhonen I O O. J Chromatogr,1983;256:221

25 Morishita F,Terashima Y,Ichhise M,et al. J Chrom Sci, 1983;21:209

26 Muller U,Dietrich P,Prescher D. J Chromatogr,1983;259:243

27 Castello G. J. Chromatogr,1984;303:61

28 Haken J K,Korhonen I O O. J Chromatogr,1984;284:474

29 Haken J K,Korhonen I O O. J Chromatogr,1984;298:89

30 Haken J K,Madden B G,Korhonen I O O. J Chromatogr,1984;298:150

31 Korhonen I O O. J Chromatogr,1984;294:99

32 Korhonen I O O. J Chromatogr,1984;298:101

33 Korhonen I O O. J Chromatogr,1984;315:185

34 Korhonen I O O,Knuutinen J. J Chromatogr,1984;292:345

35 Korhonen I O O,Knuutinen J, Jaaskelainen R. J Chromatogr,1984;287:293

36 Bermejo J,Blanco C G,Guillen M D. J Chromatogr,1985;331:237

37 Haken J K,Korhonen I O O. J Chromatogr,1985;319:131

38 Haken J K,Korhonen I O O. J Chromatogr,1985;320:325

39 Haken J K,Korhonen I O O. J Chromatogr,1985;324:343

40 Korhonen I O O. J Chromatogr,1985;324:181

41 Korhonen I O O. J Chromatogr,1985;329:43

42 Korhonen I O O. J Chromatogr,1985;329:359

43 Haken J K,Madden B G,Korhonen I O O. J Chromatogr,1985;325:61

44 Korhonen I O O,Lind M A. J Chromatogr,1985;322:83

45 Korhonen I O O,Lind M A. J Chromatogr,1985;325:433

46 Korhonen I O O,Lind M A. J Chromatogr,1985;328;325

47 常理文,竺安.色谱,1985;3;236

48 Bermejo J,Blanco C G,Guillen M D. J Chromatogr,1986;351;425

49 Castello G,D'Amato G. J Chromatogr,1986;354;65

50 Evans M B,Hanken J K,Toth T. J Chromatogr,1986;351;155

51 Haken J K,Korhonen I O O. J Chromatogr,1986;356;79

52 Haken J K,Korhonen I O O. J Chromatogr,1986;357;253

53 Haken J K,Vernon F. J Chromatogr,1985;361;57

54 Komarek K,Chufacek J,Kriz J, et al. J Chromatogr,1986;367;273

55 Evans M B,Haken J K. J Chromatogr,1987;389;240

56 Castello G,Gerbino T C. J Chromatogr,1988;437;33

57 Pacakova V,Voitechove H,Coufal P. Chromatographia,1988;25;621

58 Evans M B,Haken J K. J Chromatogr,1989;468;373

59 Ayyangar N R,Tambe A S,Biswas S S. J Chromatogr,1991;543;179

60 Dutoit J C. J Chromatogr,1991;555;191

61 Промышленникова Е В,Кириценко Б Е,Пашкевич К Ц,И Др. Изв АН СССР Сер Хим,1991;1740

62 Boneva S,Kotov St. Chromatographia,1992;34;475

63 Hassani A,Meklati B Y. Chromatographia,1992;33;267

64 Reddy K S,Dutoit J C,Kovats E. J Chromatogr,1992;609;229

（李浩春　修振佳）

第十八章　其他化合物的保留指数

第一节　有机硅化合物的保留指数

表 18-1　烷基烷氧基硅烷保留指数[50]

柱温：160℃

化合物① ＼ 固定液 I	Apiezon M	XE-60	化合物① ＼ 固定液 I	Apiezon M	XE-60
MeSi(OMe)$_3$	624	837	Me$_2$Si(OPe)$_2$	1209	1310
MeSi(OEt)$_3$	772	921	Me$_2$Si(OHex)$_2$	1396	1499
MeSi(OPr)$_3$	1015	1148	Me$_2$Si(OHept)$_2$	1587	1688
MeSi(OBu)$_3$	1271	1399	Me$_2$Si(OMe)OHept	1098	1234
MeSi(OPe)$_3$	1538	1666	Me$_2$Si(OEt)OHex	1042	—
MeSi(OHex)$_3$	1808	1937	Me$_2$Si(OPr)OPe	1027	1135
MeSi(OHept)$_3$	2085	2215	Me$_2$Si(OPr)OHept	1218	1322
MeSi(OMe)(OBu)$_2$	1078	1234	Me$_2$Si(OBu)OHex	1210	1315
MeSi(OMe)$_2$OHept	1146	1337	Et$_2$Si(OMe)$_2$	795	—
MeSi(OEt)$_2$OPe	1035	1180	Et$_2$Si(OEt)$_2$	878	—
MeSi(OEt)(OPe)$_2$	1290	1426	Et$_2$Si(OPr)$_2$	1047	
MeSi(OPr)$_2$OHex	1283	1416	Et$_2$Si(OBu)$_2$	1216	—
EtSi(OMe)$_3$	723	—	Et$_2$Si(OPe)$_2$	1394	—
EtSi(OEt)$_3$	859	—	Et$_2$Si(OHex)$_2$	1580	
EtSi(OPr)$_3$	1100	—	Pe$_2$Si(OMe)$_2$	1296	—
EtSi(OBu)$_3$	1353	—	Pe$_2$Si(OEt)$_2$	1354	—
EtSi(OPe)$_3$	1614		Me$_3$SiOMe	506	—
EtSi(OHex)$_3$	1882	—	Me$_3$SiOEt	558	—
EtSi(OEt)$_2$OPr	939	—	Me$_3$SiOPr	645	710
EtSi(OEt)$_2$OBu	1028	—	Me$_3$SiOBu	741	805
EtSi(OEt)(OPr)$_2$	1021	—	Me$_3$SiOPe	836	900
EtSi(OEt)(OBu)$_2$	1191	—	Me$_3$SiOHex	932	996
PrSi(OMe)$_3$	805	—	Me$_3$SiOHept	1030	1095
PrSi(OEt)$_3$	933	—	Et$_3$SiOMe	858	—
BuSi(OMe)$_3$	895	—	EtSiOEt	901	—
BuSi(OEt)$_3$	1013	—	Et$_3$SiOPr	986	—
PeSi(OMe)$_3$	985	—	Et$_3$SiOBu	1076	—
PeSi(OEt)$_3$	1102	—	Et$_3$SiOPe	1169	—
Me$_2$Si(OMe)$_2$	576	732	Et$_3$SiOHex	1262	—
Me$_2$Si(OEt)$_2$	678	789	Et$_3$SiOHept	1358	—
Me$_2$Si(OPr)$_2$	847	951	Bu$_3$SiOEt	1337	—
Me$_2$Si(OBu)$_2$	1024	1126			

①Me——甲基；Et——乙基；Pr——丙基；Bu——丁基；Pe——戊基；OMe——甲氧基；OEt——乙氧基；OPr——丙氧基；OBu——丁氧基；OPe——戊氧基；OHex——己氧基；OHept——庚氧基。

表 18-2　硅烷保留指数[64]

固定液：$C_{78}H_{158}$　　柱温：130℃

化合物	I
四甲基硅烷	428.0
六甲基硅烷	685.9
六甲基二硅氧烷	597.4

表 18-3　硅烷衍生物保留指数[64]

柱温：130℃

I \ 固定液 / 化合物	$C_{78}H_{158}+C_{17}H_{35}OH$
六甲基二硅烷	686.2
六甲基二硅氧烷	597.8

表 18-4　三甲基硅烷烯烃保留指数[65]

固定液	OV-225			OV-101		
I \ 柱温/℃ / 化合物	60	120	160	60	120	180
三甲基乙烯基硅烷	553	—	—	537	—	—
苯乙烯	1096	—	—	873	—	—
1,3-二(三甲基硅烷基)-1-丙烯	979	—	—	980	—	—
1-(三甲基硅烷基)-3-苯基-1-丙烯	1403	1442	—	1235	1257	—
2,4-二(三乙基硅烷基)-1-丁烯	1046	—	—	1056	—	—
2-(三甲基硅烷基)-4-苯基-1-丁烯	1507	1543	—	1340	1360	—
2,4-二苯基-1-丁烯	—	2064	2124	—	1666	1710
2,4,6-三(三甲基硅烷基)-1-己烯	1414	1403	—	—	1450	—
2,4-二(三甲基硅烷基)-6-苯基-1-己烯	—	1868	1891	—	1732	1755
2-苯基-4,6-二(三甲基硅烷基)-1-己烯	—	1934	1961	—	1774	1801
2-(三甲基硅烷基)-4,6-二苯基-1-己烯	—	—	2380	—	—	2056
2,4-二苯基-6-(三甲基硅烷基)-1-己烯		—	2474	—		2106
2,4,6-三苯基-1-己烯	—	—	2904	—	—	2359

表 18-5　烷基氯硅烷保留指数[11]

固定液	SE-30			ПМС 100			E-301			DC-550		
I \ 柱温/℃ / 化合物	70	100	140	70	100	140	70	100	140	70	100	140
甲基二氯硅烷	594	600	—	595	594	—	599	604	—	629	630	—
二甲基二氯硅烷	593	606	—	591	593	—	598	600	—	630	636	—
三甲基氯硅烷	552	555	—	549	549	—	554	554	—	575	576	—
乙基二氯硅烷	702	—	723	702		722	701	—	719	734	—	741
二乙基二氯硅烷	809	—	831	807	—	828	806	—	826	852	—	859
三乙基氯硅烷	874	—	904	874	—	902	874	—	897	—	940	955
丙基三氯硅烷	790	—	813	796	—	807	787	—	803	825	—	830
二丙基二氯硅烷	863	—	892	—	894	887	861	—	891	—	927	937
三丙基氯硅烷	980	—	984	—	987	978	978	—	995	—	1003	1022
丁基三氯硅烷	883	—	903	860	—	902	882	—	897		923	926
二丁基二氯硅烷	971	—	990	—	975	975	—	979	986	—	1006	1011
三丁基氯硅烷	—	1048	1080	—	1060	1082	—	1053	1078	—	1140	1193
戊基三氯硅烷	992	—	999	—	990	995	—	992	993	—	988	996
二戊基二氯硅烷	—	1065	1080	—	1074	1071	—	1079	1090	—	1103	1076
三戊基氯硅烷	—	1120	1155	—	1130	1140	—	1150	1160	—	—	—

表 18-6 氯硅烷保留指数[6]

固定液	ПМС 20000		ФС-303		固定液	ПМС-20000		ФС-303	
化合物	柱温/℃	I	柱温/℃	I	化合物	柱温/℃	I	柱温/℃	I
三氯硅烷	50	496.3	50	556.96	间氯苯基三氯硅烷	180	1313.2	140	1510.5
甲基二氯硅烷	50	506.6	50	628.7	对氯苯基三氯硅烷	180	1316.0	140	1517.0
二甲基氯硅烷	50	485.0	50	599.6	二甲基邻氯苯基氯硅烷	180	1284.5	140	1486.1
四氯化硅	50	566.8	50	615.9	二甲基间氯苯基氯硅烷	180	1282.8	140	1539.7
三甲基氯硅烷	50	552.4	50	684.5	二甲基对氯苯基氯硅烷	180	1289.5	140	1540.9
甲基三氯硅烷	50	598.9	50	714.1	甲基邻氯苯基二氯硅烷	180	1343.0	140	1567.1
二甲基二氯硅烷	50	596.1	50	745.7	甲基间氯苯基二氯硅烷	180	1320.4	140	1570.6
乙基二氯硅烷	50	622.7	50	732.8	甲基对氯苯基二氯硅烷	180	1323.7	140	1577.2
甲基乙烯基二氯硅烷	50	680.0	50	824.1	邻氯苯基苯基二氯硅烷	225	1904.9	225	2279.1
乙烯基三氯硅烷	50	682.6	50	792.1	间氯苯基苯基二氯硅烷	225	1879.3	225	2246.5
乙基三氯硅烷	90	713.1	90	830.8	对氯苯基苯基二氯硅烷	225	1891.8	225	2254.0
甲基乙基二氯硅烷	90	709.8	90	864.3	甲基二氯苯基二氯硅烷	180	1483.1	180	1777.1
二乙基硅烷	90	743.7	90	757.1	二苯基硅烷	180	1441.8	180	1659.4
乙基乙烯基二氯硅烷	90	796.4	90	936.4	甲基二苯基氯硅烷	225	1675.2	180	1947.6
丙基三氯硅烷	90	801.3	90	928.2	二苯基二氯硅烷	225	1724.2	180	2002.4
甲基氯甲基二氯硅烷	90	785.8	90	980.1	二苯基氯硅烷	225	1620.0	180	1866.2
二乙基二氯硅烷	90	822.6	90	972.2	甲基三氯苯基二氯硅烷	225	1664.3	180	1928.2
四乙基硅烷	90	923.5	90	933.0	二氯苯基二氯硅烷	225	1524.1	180	1742.3
丁基三氯硅烷	—	—	90	1025.7	联苯基三氯硅烷	225	1909.3	225	2249.3
三乙基氯硅烷	120	900.2	120	1032.9	邻二苯基苯	225	1910.1	225	2145.6
甲基苯基硅烷	120	879.7	120	1010.0	间二苯基苯	—	—	225	2557.0
甲基苯基氯硅烷	120	1028.4	120	1235.8	间双(苯基二氯甲硅基)苯	250	2286.5	—	—
二甲基苯基硅烷	120	946.2	120	1076.9	三苯基氯硅烷	250	2191.0	250	2542.0
苯基二氯硅烷	120	1052.?	120	1271.1	联苯	225	1398.7	225	1705.0
二甲基苯基氯硅烷	140	1099.3	140	1334.0	邻氯联苯	225	1543.4	225	1820.0
苯基三氯硅烷	140	1144.0	140	1339.2	对氯联苯	225	1625.5	225	1952.0
甲基苯基二氯硅烷	140	1140.6	140	1384.0	对,对'-二氯联苯	225	1821.6	225	2216.0
邻氯苯基三氯硅烷	180	1363.6	140	1575.0	苯基(二氯苯基)二氯硅烷	250	2073.0	250	2456.0

表 18-7 有机硅化合物保留指数[39]

固定液	SE-30				50%甲基-β-氰乙基聚硅氧烷			
柱温/℃ I 化合物	60	80	120	150	60	80	120	150
三氯硅烷	490	—	—	—	534	—	—	—
二甲基一氯硅烷	485	—	—	—	558	—	—	—
甲基二氯硅烷	503	—	—	—	594	—	—	—
四氯化硅	570	—	—		582	—	—	—
三甲基一氯硅烷	552		—	—	626	—	—	—
甲基三氯硅烷	597	—	—	—	672	—	—	—
二甲基二氯硅烷	596		—	—	689	—	—	—
甲基乙烯基二氯硅烷	680	—	—	—	776	—	—	—
二甲基乙烯基一氯硅烷	643	—	—	—	722	—	—	—
六甲基二硅氧烷	687	—	—	—	678	—	—	—
甲基三甲氧基硅烷	—	711	—	—	—	799	—	—
二甲基二乙氧基硅烷		754		—	—	793	—	—
甲基三乙氧基硅烷	—	—	862	—	—		916	

续表

固定液	SE-30				50%甲基-β-氰乙基聚硅氧烷			
I 柱温/°C 化合物	60	80	120	150	60	80	120	150
六甲基二硅氮烷	—	—	800	—	—	—	828	—
四甲基二乙烯基二硅氧烷	—	—	847	—	—	—	853	—
六甲基环三硅氧烷	—	—	809	—	—	—	796	—
八甲基环四硅氧烷	—	—	992	—	—	—	950	—
四甲基四氢环四硅氧烷	—	—	819	—	—	—	821	—
十甲基环五硅氧烷	—	—	—	1150	—	—	—	1105
十二甲基环六硅氧烷	—	—	—	1337	—	—	—	1319
十四甲基环七硅氧烷	—	—	—	1507	—	—	—	1454
甲基苯基二氯硅烷	—	—	—	1146	—	—	—	1324
甲基-β-氰乙基二氯硅烷	—	—	—	1033	—	—	—	1450
苯基三氯硅烷	—	—	—	1156	—	—	—	1299
四甲基二氯二硅氧烷	—	—	—	834	—	—	—	934
十甲基四硅氧烷	—	—	—	1058	—	—	—	1019
十二甲基五硅氧烷	—	—		1241	—	—	—	1184
十四甲基六硅氧烷	—	—	—	1403	—	—	—	1345

表 18-8 烷氧基氯硅烷保留指数[12]

固定液	Apiezon L		SE-30		ФС-16	
I 柱温/°C 化合物	100	150	100	150	100	170
四氯化硅	558	568	578	590	600	615
甲氧基三氯硅烷	—	—	—	—	728	—
二甲氧基二氯硅烷	—	—	—	—	782	—
三甲氧基氯硅烷	—	—	—	—	832	—
四甲氧基硅烷	668	—	760	—	858	
乙氧基三氯硅烷	676	704	655	646	758	763
二乙氧基二氯硅烷	783	781	830	819	908	927
三乙氧基氯硅烷	847	840	920	916	995	1011
四乙氧基硅烷	869	850	960	940	1025	1007
丙氧基三氯硅烷	790	786	813	800	860	855
二丙氧基二氯硅烷	954	953	1020	1004	1080	1075
三丙氧基氯硅烷	1090	1082	1190	1165	1230	1227
四丙氧基硅烷	1170	1157	1287	1270	1330	1320
丁氧基三氯硅烷	881	876	900	894	950	942
二丁氧基二氯硅烷	1140	1135	1190	1187	1245	1250
三丁氧基氯硅烷	1350	1335	1420	1420	1470	1460
四丁氧基硅烷	1490	1480	1590	1580	1640	1620
戊氧基三氯硅烷	990	980	1010	1000	1050	1045
二戊氧基二氯硅烷	1330	1320	1510	1405	1430	1410
三戊氧基氯硅烷	1650	1640	1710	1690	1750	1730
四戊氧基硅烷	1920	1905	1960	1950	2020	1990
己氧基三氯硅烷	1980	1045	1130	1125	1145	1120

表 18-9 卤代硅烷保留指数[18]

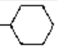
固定液	甲基硅油 AK12500		甲基硅油 NM1-1000	固定液	甲基硅油 AK12500		甲基硅油 NM1-1000
I 柱温/℃ 化合物	90	140	140	I 柱温/℃ 化合物	90	140	140
$SiCl_4$	585	—	542	$SiBr_2I_2$	—	1181	—
$SiCl_3Br$	667	—	—	$SiBrI_3$	—	1300	—
$SiCl_2Br_2$	749	—	—	SiI_4	—	1419	1458
$SiClBr_3$	831	—	—	$SiCl_3I$	—	—	771
$SiBr_4$	914	943		$SiCl_2I_2$	—	—	1000
$SiBr_3I$	—	1062	—	$SiClI_3$	—	—	1229

表 18-10 含氮有机硅化合物保留指数[28]

固定液	Apiezon L				SE-30				ПМС-100			
I 柱温/℃ 化合物	100	140	200	240	100	140	200	240	100	140	200	240
$[(CH_3)_2HSi]_2NH$	651	641	—	—	687	696	—	—	691	680	—	—
$[(CH_3)_2HSi]_2N$	848	849	—	—	899	900	—	—	897	902	—	—
$[(CH_3)_2HSi]_2NSiH_2C_6H_5$	—	1279	1295	1302	—	1445	1483	1513	—	1310	1349	1369
$[(CH_3)_2HSi]_2NSiHCH_2C_6H_5$	—	1352	1367	1372	—	1520	1544	1556	—	1379	1417	1426
$[(CH_3)_2Si]_2NH$	736	725	—	—	806	798	—	—	691	680	—	—
$[(CH_3)_2Si]_2NSiH(CH_3)_2$	994	995	—	—	1043	1050	—	—	1032	1038	—	—
$[(CH_3)_2Si]_2NSiH_2C_6H_5$	—	1425	1442	1466	—	1594	1630	1648	—	1445	1462	1512
$[(CH_3)_2Si]_2NSiHCH_3C_6H_5$	—	1498	1515	1526	—	1670	1688	1718	—	1514	1552	1601
$[(CH_3)_2Si]_2NSiH(C_6H_5)_2$	—	—	—	1989	—	—	—	2301	—	—	—	2062
$[CH_3(C_2H_3)SiNH]_3$	—	—	1260	1267	—	—	1503	1508	—	—	1317	1327
$[CH_3(C_2H_3)SiNH]_4$	—	—	1566	1570	—	—	1868	1897	—	—	1652	1688
$[(CH_3)_2SiNH]_3$	1008	1007	—	998	1210	1205	1206	1209	1067	1062	1056	152
$[(CH_3)_2SiNH]_4$	—	—	1270	1278	—	—	1521	1534	—	—	1362	1380
$[(CH_3)_2SiNH]_2Si(CH_3)_2$	1000	993	—	—	1125	1115	—	—	1100	1090	—	—
$[CH_3OSi(CH_3)_2]_2NH$	898	884	—	—	983	968	—	—	971	954	—	—
$[CH_3SiHC_6H_5]_2NH$	—		1745	1773	—	—	2093	2163	—	—	1800	1814
$[(CH_3)_4Si_2NH]_2$	976	970	—	—	1068	1063	—	—	1078	1076	—	—
$[(CH_3)_2SiN]_3[SiH(CH_3)_2]_2$	—	1410	1427	1451	—	1591	1607	1616	—	1519	1519	1550
$[CH_3(C_6H_5)HSi]_3N$	—	—	—	1958	—	—	—	2342	—	—	—	1992
$C_6H_5Si(CH_3)C_6H_5NH_2$	—	—	—	2403	—	—	—	2861	—	—	—	2532

表 18-11 硅氧烷保留指数[34]

柱温：100℃

I 固定液 化合物	Apiezon L	SE-30	Reoplex 400	Carbowax 1500	I 固定液 化合物	Apiezon L	SE-30	Reoplex 400	Carbowax 1500
$(CH_3)_3SiOCH_3$	543	555	644	657	$(CH_3)_3SiO$—  ①	976	1009	1100	1096
$(CH_3)_3SiOC_2H_5$	565	612	699	708	$(CH_3)_3SiOCH_2CH_2Cl$	—	832	1096	1095
$(CH_3)_3SiOC_3H_7$	654	700	768	768	$(CH_3)_2Si(OC_2H_5)_2$	688	745	902	912
$(CH_3)_3SiOC(CH_3)_3$	656	706	723	735	$(CH_3)_2Si(OC_3H_7)_2$	859	921	1031	1045
$(CH_3)_3SiOCH_2CH{=}CH_2$	657	700	832	840	$(CH_3)_2Si[OCH(CH_3)_2]_2$	753	822	896	910
$(CH_3)_3SiOCH_2C{\equiv}CH$	672	729	992	1005	$CH_3Si(OC_2H_5)_3$	789	867	1059	1079
$[(CH_3)_3Si]_2O$	601	677	640	674	$Si(OC_2H_5)_4$	870	967	1171	1210
$[H(CH_3)_2Si]_2O$	518	570	585	595	$CH_3(C_6H_5)Si(OC_2H_5)_2$①	—	1237	—	—
$(CH_3)_3SiOSi(CH_3)_2H$	562	627	615	636	$(CH_3)_3SiOCOC_6H_5$①	1125	1149	—	—
$(CH_3)_3SiOC_4H_9$①	749	792	864	867	$[ClCH_2(CH_3)_2Si]_2O$①	1065	1134	1433	1474
$(CH_3)_3SiOCH_2CH(CH_3)_2$①	701	751	795	796	$(CH_3)_3SiOCH(CH_3)_2$	—	—	704	706

①柱温 150℃。

表 18-12 甲基环硅氧烷保留指数[22]

固定液	Apiezon L		SE-30	HMC-100	固定液	Apiezon L		SE-30	HMC-100
柱温/°C I 化合物	240	180	180	180	柱温/°C I 化合物	240	180	180	180
[MeHSiO]$_4$	642	674	709	776	[MeHSiO]$_9$	1102			-
[MeHSiO]$_5$	742	780	813	950	[MeHSiO]$_{10}$	1179			—
[MeHSiO]$_6$	841	884	960	1100	[MeHSiO]$_{11}$	1248	—	—	-
[MeHSiO]$_7$	933	984	1076	1228	[MeHSiO]$_{12}$	1323	—	—	—
[MeHSiO]$_8$	1021	1078	1186	1356					

表 18-13 乙基环硅氧烷保留指数[22]

固定液	Apiezon L		SE-30	HMC-100	固定液	Apiezon L		SE-30	HMC-100
柱温/°C I 化合物	300	260	260	260	柱温/°C I 化合物	300	260	260	260
[EtHSiO]$_4$	1011	1040	1071	1186	[EtHSiO]$_8$	1664	—	—	—
[EtHSiO]$_5$	1205	1222	1279	1428	[EtHSiO]$_9$	1801	—	—	—
[EtHSiO]$_6$	1381	1386	1467	1660	[EtHSiO]$_{10}$	1935	—	—	—
[EtHSiO]$_7$	1528	1537	1641	1871					

第二节 医药类化合物的保留指数

表 18-14 巴比妥保留指数（一）[18]

柱温：200°C

固定液 I 化合物	OV-1	OV-17	固定液 I 化合物	OV-1	OV-17
水杨酰胺	1450	1805	硫喷妥	1855	2140
巴比妥	1480	1800	环己巴比妥	1860	2210
非那西丁	1681	2030	导眠能	1845	2200
异戊巴比妥	1715	1985	甲基苯巴比妥	1890	2250
戊巴比妥	1730	2020	苯巴比妥	1955	2380
司可巴比妥	1790	2070	环巴比妥	1970	2350
咖啡因	1800	2260	安眠酮	2130	2570

表 18-15 巴比妥保留指数（二）[48]

柱温：200°C

固定液 I 化合物	SE-30	固定液 I 化合物	SE-30	固定液 I 化合物	SE-30
二烯丙巴比妥	1586	烯丙环戊烯巴比妥	1858	苯甲基巴比妥酸	1875
异戊巴比妥	1700	庚巴比妥	2035	丙巴比妥	1550
烯丙异丙巴比妥	1600	己巴比妥	1835	司可巴比妥	1770
巴比妥	1482	溴丙巴比妥	1866	仲丁巴比妥	1650
溴双烯巴比妥	1812	烯丙丁巴比妥	1698	溴烯丙仲戊巴比妥	2031
异丁巴比妥	1658	烯丙新戊巴比妥	1720	仲丁烯巴比妥	1701
正丁巴比妥	1646	戊巴比妥	1733	仲戊烯巴比妥	1755
环巴比妥	1945	苯巴比妥	1934		

表 18-16 巴比妥酸烷基酯保留指数 (I) (一)[15]

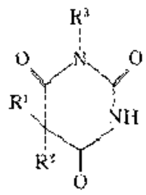
固定液	OV-101						Dexsil 300					
柱温/℃	168	170	195	200	205	214	170	170	195	200	205	214
化合物 \ 烷基酯	甲酯	乙酯	丙酯	丁酯	戊酯	己酯	甲酯	乙酯	丙酯	丁酯	戊酯	己酯
巴比妥	1416	1488	1662	1820	2011	2206	1469	1532	1700	1866	2047	2230
丙巴比妥	1466	1558	1728	1898	2080	2260	1531	1597	1765	1932	2108	2300
二烯丙巴比妥	1498	1578	1744	1899	2058	2275	1540	1603	1767	1926	2107	2290
烯丙异丙巴比妥	1511	1599	1770	1926	2110	2293	1567	1633	1800	1962	2137	2328
仲丁巴比妥	1549	1635	1798	1950	2132	2316	1593	1661	1826	1972	2173	2340
正丁巴比妥	1558	1635	1798	1950	2137	2325	1606	1662	1832	1980	2160	2343
异戊巴比妥	1597	1672	1837	1991	2171	2354	1642	1697	1860	2009	2190	2370
烯丙新戊巴比妥	1599	1696	1860	2018	2200	2378	1641	1722	1880	2030	2213	2398
乙烯仲戊巴比妥	1629	1698	1861	2018	2198	2385	1673	1723	1885	2039	2218	2395
戊巴比妥	1625	1707	1873	2020	2210	2394	1679	1741	1905	2059	2239	2420
仲戊烯巴比妥	1649	1723	1890	2040	2224	2411	1696	1757	1918	2073	2253	2432
烯丙羟丙巴比妥	1672	1737	1898	2050	2247	2421	1725	1784	1953	2097	2277	2455
司可巴比妥	1665	1747	1910	2040	2243	2421	1711	1775	1935	2083	2265	2443
甲己炔巴比妥	1714	1759	1850	1924	2026	2112	1757	1785	1861	1969	2038	2135
溴双烯丙巴比妥	1707	1800	1970	2121	2309	2499	1769	1848	2015	2169	2335	2538
环己巴比妥	1799	1831	1925	2062	2107	2205	1889	1895	1990	2083	2150	2270
甲基苯巴比妥(mephebarb.)	1781	1832	2000	2163	2347	2528	1876	1895	2060	2221	2403	2589
苯巴比妥	1828	1881	2054	2212	2395	2577	1912	1935	2105	2259	2415	2628
环巴比妥	1845	1909	2078	2236	2419	2605	1925	1960	2125	2283	2467	2648
庚巴比妥	1926	1994	2164	2322	2502	2690	2025	2052	2230	2375	2559	2740
双环辛巴比妥	1991	2056	2230	2387	2568	2751	2100	2120	2290	2439	2625	2803
甲基苯巴比妥(mephobarb.)	1827	1848	1946	2032	2135	2217	1911	1912	2001	2098	2195	2291
烯丙环戊烯巴比妥	1742	1839	1989	2143	2324	2417	1811	1864	2034	2192	2375	2557

表 18-17 巴比妥酸烷基酯保留指数 (I) (二)[15]

固定液	OV-7						SP-2250					
柱温/℃	166	167	180	188	226	244	160	163	190	191	228	246
化合物 \ 烷基酯	甲酯	乙酯	丙酯	丁酯	戊酯	己酯	甲酯	乙酯	丙酯	丁酯	戊酯	己酯
巴比妥	1508	1584	1750	1918	2113	2307	1609	1659	1833	1978	2190	2383
丙巴比妥	1600	1650	1809	1981	2175	2308	1675	1724	1896	2055	2291	2483
二烯丙巴比妥	1603	1676	1833	1995	2190	2381	1704	1753	1920	2069	2271	2461
烯丙异丙巴比妥	1622	1695	1855	2017	2213	2408	1721	1773	1940	2092	2255	2455
异丁巴比妥	1652	1726	1878	2022	2220	2414	1742	1793	1953	2097	2294	2482
正丁巴比妥	1662	1726	1881	2043	2230	2418	1753	1796	1957	2106	2302	2490
异戊巴比妥	1698	1760	1913	2070	2262	2447	1786	1825	1984	2134	2328	2511
烯丙新戊巴比妥	1698	1784	1935	2093	2286	2475	1791	1850	2012	2159	2357	2542
乙烯仲戊巴比妥	1742	1791	1946	2110	2297	2484	1841	1868	2028	2174	2375	2562
戊巴比妥	1729	1799	1953	2114	2304	2493	1823	1868	2031	2180	2379	2566
仲戊烯巴比妥	1767	1828	1980	2143	2330	2517	1870	1909	2068	2217	2413	2600
烯丙羟丙巴比妥	1817	1876	2028	2187	2376	2565	1945	1965	2140	2279	2482	2671
司可巴比妥	1770	1839	1990	2148	2338	2525	1865	1909	2070	2214	2413	2599
甲己炔巴比妥	1845	1887	1963	2046	2151	2253	1957	1983	2070	2149	2255	2362
溴双烯丙巴比妥	1849	1937	2083	2242	2447	2643	1980	2031	2200	2336	2556	2752
环己巴比妥	1957	1979	2063	2145	2265	2374	2093	2092	2189	2254	2390	2499
甲基苯巴比妥(mephebarb.)	1953	1984	2136	2300	2493	2698	2103	2099	2266	2421	2630	2823
苯巴比妥	1988	2026	2182	2342	2538	2739	2134	2140	2309	2450	2667	2862
环巴比妥	1988	2036	2193	2358	2553	2740	2123	2140	2310	2447	2667	2860
庚巴比妥	2067	2121	2278	2441	2642	2839	2206	2225	2400	2530	2759	2953
双环辛巴比妥	2132	2186	2354	2507	2712	2911	2278	2296	2471	2607	2834	3030
甲基苯巴比妥(mephobarb.)	1988	2011	2097	2179	2297	2405	2134	2129	2228	2303	2434	2542
烯丙环戊烯巴比妥	1876	1941	2097	2259	2461	2655	2000	2034	2206	2355	2565	2758

表 18-18 巴比妥酸衍生物保留指数[43]

固定液：SE-30



化合物 R¹	R²	R³	I 190℃	I 200℃
烯丙基	烯丙基	H	1586	1491
乙基	异戊基	H	1700	1600
异丙基	烯丙基	H	1600	1513
乙基	乙基	H	1482	1415
烯丙基	2-溴烯丙基	H	1842	1741
异丁基	烯丙基	H	1658	1553
乙基	正丁基	H	1645	1557
乙基	环-1-己烯基	H	1945	1850
烯丙基	环-2-戊烯基	H	1858	1751
异丙基	烯丙基	甲基	1559	1522
乙基	环-1-庚烯基	H	2035	1932
乙基	正己基	H	1835	1748
甲基	环-1-己烯基	甲基	1850	1800
异丙基	2-溴烯丙基	H	1866	1759
正丁基	烯丙基	H	1698	1608
乙基	乙基	甲基	1450	1410
烯丙基	1-甲基-2-戊炔基	甲基	1768	1721
乙基	苯基	甲基	1882	1832
2,2-二甲基丙基	烯丙基	H	1720	1609
乙基	1-甲基丁基	H	1733	1632
乙基	苯基	H	1934	1831
甲基	苯基	H	1875	1789
乙基	异丙基	H	1550	1480
1-甲基丁基	烯丙基	H	1770	1670
乙基	1-甲基丙基	H	1650	1554
1-甲基丁基	2-溴烯丙基	H	2031	1901
1-甲基丙基	烯丙基	H	1704	1592
乙基	1-甲基-1-丁烯基	H	1755	1650

表 18-19 安定类药物的保留指数[32]

固定液	SE-30	OV-17	SE-30	OV-17
化合物 \ I \ 柱温/℃	250		280	
利眠宁	2570	3070	2660	3150
	2845	3220	2910	3595
去甲氧安定	2575	3060	—	3140
去甲基利眠宁碱	2885	3485	2930	3590
安定	2490	2950	2510	3020
去甲安定	2555	3060	2585	3125
3-羟基安定	2630	3125	2675	3002
去甲羟基安定	2380	2830	2425	2890
硝基安定	—	—	2830	3455
7-氨基硝基安定	2785	—	2870	3475
7-乙酰氨基硝基安定		—	3205	3815
去氯安定碱	—	3070	2655	3125
氯羟去甲安定	2140	2925	2515	2980
环丙安定	—	—	2715	3180
3-羟基环丙安定	—	—	2860	3375
氯硝安定	—	—	2965	3520

固定液	SE-30	OV-17	SE-30	OV-17
化合物 \ I \ 柱温/℃	250		280	
7-氨基氟硝安定	—	—	2905	3560
7-乙酰氨基氟硝安定	—	—	3270	3970
氟胺安定	—	—	2800	3275
N-1-去烷基氟胺安定	2500	3020	2510	3060
N-1-羟基乙基氟胺安定	2715	3235	2730	3253
溴吡二氮䓬	2670	3260	2700	3355
3-羟基溴吡二氮䓬	2540	3020	2570	3070
氟硝安定	2645	3170	2680	3195
去甲氟硝安定	2735	3320	2745	3350
7-氨基氟硝安定	2725	3280	2720	3305
7-乙酰氨基氟硝安定	—	—	3115	2750
7-氨基去甲氟硝安定	—	—	2825	3550
氯异安定	2660	3170	2645	3170
去甲氯异安定	2815	3315	2695	3295
磷安定	2605	—	2615	3155

表 18-20 局部麻醉药物保留指数[41]

固定液	OV-101		OV-7		OV-25		OV-101		OV-7		OV-25	
化合物	t_c/℃	I	t_c/℃	I	t_c/℃	I	t_c/℃	I	t_c/℃	I	t_c/℃	I
异戊卡因	150	1582	150	1671	150	1861	160	1588	160	1676	160	1868
丙胺卡因	170	1822	170	1969	170	2240	180	1829	180	1975	180	2248
利多卡因	170	1859	170	1999	170	2266	180	1866	180	2006	180	2275
衣铁卡因	180	2024	170	2130	170	2368	190	2030	180	2138	180	2377
二甲卡因	180	1968	180	2108	180	2376	190	1974	190	2114	190	2388
丁苯胺卡因	180	2008	180	2170	180	2481	190	2013	190	2178	190	2492
普鲁卡因	180	1998	180	2177	180	2528	190	2005	190	2184	190	2539
甲哌卡因	180	2042	180	2202	180	2521	190	2049	190	2213	190	2538
丁卡因	210	2224	210	2388	210	2713	220	2229	220	2394	220	2723
丙吗卡因	210	2263	210	2419	210	2725	220	2270	220	2427	220	2736
盐酸丁氧普鲁卡因	210	2388	210	2566	210	2913	220	2392	220	2571	220	2922

表 18-21 兴奋剂类药物保留指数（一）[7]

固定液	Apiezon L KOH		聚乙二醇-20M KOH	
化合物 \ 柱温/℃ \ I	150	190	150	190
2-氨基庚烷	807	--		--
甲胺基庚烷	991	·	1127	—
2-甲基-6-甲胺基-2-庚烯	1023	—	1289	—
新 N-乙基-α-甲基间(三氟甲基)苯乙基胺	1096	—	1608	—
环戊烷胺	1098	—	1327	—
右旋苯异丙胺	1148	—	1656	—
N-乙基-α-甲基间(三氟甲基)苯乙基胺	1177	—	1562	—
α,α 二甲基苯乙基胺	1183	—	1638	—
N,α-二甲基-2-环己基乙基胺	1193	—	1421	—
甲基苯异丙胺	1200	—	1623	—
N-甲基-α-氨基丙酸	1220	—	1762	—
乙基苯异丙胺	1241	—	1629	—
(±)反 2-苯基丙醇胺	1248	1271	1852	1915
N α,α'-三甲基(±)苯乙基胺	1277	—	1677	—
苯基丙醇胺	1339	1369	2212	2295
茶碱	1353	1392	1876	1926
麻黄碱	1358	1400	2072	2179
假麻黄碱	1362	1398	2195	2217
对氯-α,α-二甲基苯乙基胺	1380	1422	1916	1950
甲基麻黄碱	1405	1437	2022	2108
2-苯基环戊胺	1419	1456	1976	2022
二环己酰胺	1442	—	1673	—
N,N-二乙基菸酰胺	1462	1506	—	2386
2-甲基-3-哌啶子基吡嗪	1473	1499	1969	2015
3,4-二甲基-2-苯基吗啉	1475	1505	2009	2057
2-二乙基氨基丙酮苯	1477	1500	1991	2023
降右旋-ψ-麻黄碱	—	1369	—	2341
3-甲基-2-苯基吗啉	—	1485	—	2158
N-苄基环丙烷基氨基甲酸酯	—	1586	-	2261
糠基苯异丙胺	—	1623	—	2278
1-(α-丙基苯乙基)吡咯烷	—	1649	—	2011
2-乙胺基-3-苯基降莰烷	—	1716	—	2185

表 18-22 兴奋剂类药物保留指数（二）[30]

固定液	OV 101		OV-225		Apiezon L		PEG 20M	
化合物 \ 柱温与 I 值	I	t_c/℃	I	t_c/℃	I	t_c/℃	I	t_c/℃
甲异辛烯胺	1033	100	1145	150	1016	100	1218	70
苯丙胺	1117	120	1430	120	1132	120	1581	120
去甲氟苯丙胺	1136	120	1435	120	1092	120	1560	115
全氢苯叔丁胺	1167	150	1341	150	1152	120	1359	100
苯叔丁胺	1173	150	1473	150	1168	120	1575	120
环己丙甲胺	1185	150	1348	150	1179	120	1354	100

续表

固定液	OV-101		OV-225		Apiezon L		PEG 20M	
化合物 \ 柱温与 I 值	I	t_c/°C	I	t_c/°C	I	t_c/°C	I	t_c/°C
甲基苯丙胺	1186	150	1473	150	1187	120	1562	120
反苯环丙胺	1206	120	1657	150	1225	120	1834	120
氯苯丙胺	1226	120	1437	120	1183	120	1531	120
N-乙基苯丙胺	1232	120	1504	120	1233	120	1571	120
优降宁	1232	150	1510	150	1216	120	1648	130
N,N-二甲基苯丙胺	1243	120	1508	120	1251	120	1568	120
甲苯丁胺	1250	120	1566	140	1275	120	1611	120
苯戊胺	1256	150	1563	150	1261	140	1648	130
N-异丙基苯丙胺	1257	120	1442	120	1253	120	1552	120
辛戊胺	1303	150	1358	150	1281	140	1373	100
去甲伪麻黄碱	1319	150	1771	150	1342	150	2176	180
烯丙苯乙胺	1320	140	1697	150	1311	140	1814	140
N-正丙基苯丙胺	1325	150	1599	140	1326	140	1634	120
N-2-丁基苯丙胺	1365	150	1604	140	1356	150	1635	120
氯代苯叔丁胺	1369	150	1781	160	1394	160	1871	150
N,N-二乙基苯丙胺	1371	150	1592	140	1370	150	1609	120
尼古丁	1377	200	1714	150	1355	150	1848	160
甲氧苯丙甲胺	1386	150	1768	150	1365	150	1880	130
N-甲基-N-正丙基苯丙胺	1396	150	1628	140	1405	160	1673	140
N-甲基麻黄碱	1405	150	1808	150	1426	160	2042	160
N-正丁基苯丙胺	1422	150	1687	150	1428	160	1732	130
N-乙基对氯代苯丙胺	1434	150	1788	160	1456	160	1860	150
苯甲吗啉	1486	200	1930	200	1468	160	2065	150
N-甲基-N-正丁基苯丙胺	1486	150	1717	150	1488	160	1743	130
苯双甲吗啉	1492	200	1878	200	1485	160	1963	140
3,4-亚甲二氧苯丙胺	1495	150	2019	180	1484	160	2204	180
N,N-二正丙基苯丙胺	1526	150	1735	150	1534	180	1745	130
二乙胺苯丙酮	1527	200	1903	200	1490	160	1965	160
尼可刹米	1544	200	2231	200	1487	160	2319	180
戊四氮	1570	200	2585	200	1649	180	2683	200
二苯胺	1619	200	2213	200	1668	180	2517	190
苯咯戊烷	1626	170	1905	160	1651	180	1946	150
3,4-亚甲二氧苯叔丁胺	1646	200	2149	200	1681	180	2379	180
N,N-二正丁基苯丙胺	1689	170	1891	160	1565	180	1902	150
苯乙胺去甲樟烷	1697	200	2041	200	1747	230	2125	160
N-苄基苯丙胺	1784	170	2300	180	1866	230	2390	190
苄甲苯丙胺	1902	250	2254	200	1902	240	2392	190

表 18-23 维生素 A 类化合物保留指数[58]

固定相	DB-1		DB-225		固定相	DB-1		DB-225	
化合物	t_c/°C	I	t_c/°C	I	化合物	t_c/°C	I	t_c/°C	I
甲九平	100	1216		—	脱水维生素 A	240	2233	220	2468
牻牛儿醛	100	1244	—	—	维生素 A	240	2453	—	—
α-紫罗兰酮	145	1416	—	—	维生素 A 醛	240	2466	—	—
β-紫罗兰醇	145	1406	—	—	维生素 A 酸甲酯	240	2528	220	3200
β-紫罗兰酮	145	1469	—	—	乙酸维生素 A 酯	190	2531	—	—
乙酸 β-紫罗兰酯	150	1525	—	—	丁酸维生素 A 酯	190	2738	—	—
抗干眼烯	220	2148	—	—	己酸维生素 A 酯	220	2970	—	—

续表

固定相	DB-1		DB-225		固定相	DB-1		DB-225	
化合物	t_c/°C	I	t_c/°C	I	化合物	t_c/°C	I	t_c/°C	I
辛酸维生素A酯	220	3157	—	—	十二酸维生素A酯	240	3577	—	—
癸酸维生素A酯	220	3359	—	—					

表 18-24 有机磷酯类化合物保留指数[42]

固定液：OV-17　　柱温：160℃

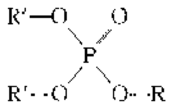
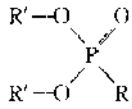
化合物	R'	R	I	化合物	R'	R	I
					—C_2H_5	—C_2H_5	1246
	C_2H_5	CH_3	1205		—C_2H_5	—C_3H_7	1340
	—C_2H_5	—C_2H_5	1296		—C_2H_5	—C_4H_9	1430
	—C_2H_5	—C_3H_7	1390		—C_2H_5	—C_5H_{11}	1525
	C_2H_5	C_4H_9	1482		—C_3H_7	—C_2H_5	1420
	C_2H_5	—C_5H_{11}	1579		—C_3H_7	—C_3H_7	1510
	—C_2H_5	C_6H_{13}	1674		—C_3H_7	—C_4H_9	1604
					—C_3H_7	—C_5H_{11}	1700

表 18-25 β-受体阻滞药物保留指数[35]

固定液：OV-17

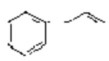
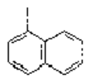
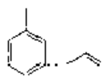
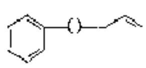
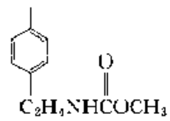
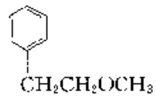
化合物 \ I \ 柱温/℃		255	265	化合物 \ I \ 柱温/℃		255	265
邻烯丙心安		3064	—	萘心安		3535	—
[类似]间烯丙心安		3121	—	烯丙氧心安			3200
[类似]对烯丙心安		3186	—	氨甲酯心定		—	3568
甲氧乙心安		3346	3360				

表 18-26 儿茶酚胺（丁硼酸酯衍生物）保留指数[36]

固定液：OV-1

化合物 \ I \ 柱温/℃	140	170	190	化合物 \ I \ 柱温/℃	140	170	190
β-羟基苯基乙基胺	1799	—	—	苯福林	—	2171	—
去甲伪麻黄碱	1774		—	去甲间甲肾上腺素	—	—	2135
苯丙醇胺	1776		—	间甲肾上腺素	—	—	2275
假麻黄碱	1782			去甲肾上腺素	—		2478
麻黄碱	1796		—	肾上腺素	—	—	2438
去甲对羟福林	—	2218		3,4 二羟基去甲伪麻黄碱	—		2450
1 去氧去甲肾上腺素	—	2203	—	异丙肾上腺素	—	—	2512
对羟福林		2185	—				

表 18-27 类甾醇（TMS 衍生物）保留指数[25]

固定液	OV-101	Dexsil	OV-7	SP-2250	固定液	OV-101	Dexsil	OV-7	SP-2250
柱温/℃ I 化合物	263		270	280	柱温/℃ I 化合物	263		270	280
雄-5-烯-3β,16α,17β-三醇	2889	2886	2899	2941	6α,17β-二羟基-5α-雄烷-3-酮	2856	2990	2938	3037
雄-5-烯-3β,16β,17β-三醇	2914	2923	2922	2972	5α-雄烷-2α,3α,17β-三醇	2755	2749	2741	2760
5α 雄烷 3,6,17 三酮	2789	3127	3080	3346	5α-雄烷-2β,3α,17β-三醇	2737	2714	2713	2730
5α 雄烷-3,7,17-三酮	2584	2740	2808	2797	5α-雄烷-2β,3α,17β-三醇	2869	2881	2854	2882
3β-羟基-5α-雄烷-6,17 二酮	2826	3063	3022	3230	5α-雄烷-3α,6β,17β-三醇	2697	2675	2672	2701
3β-羟基-5α-雄烷-7,17-二酮	2790	2987	2962	3137	5α-雄烷-3α,17β,17β-三醇	2743	2740	2739	2771
17β-羟基-5α 雄烷-3,6-二酮	2920	3093	3026	3210	5α-雄烷-3α,16α,17β-二醇	2802	2802	2773	2807
3α,17β-二羟基-5α-雄烷-6-酮	2793	2893	2872	2970	5α-雄烷-3β,6α,17β-三醇	2854	2817	2823	2856
3β,6α-二羟基 5α 雄烷-17 酮	2755	2861	2861	2972	5α 雄烷-3β,6β,17β-三醇	2775	2748	2775	2810
3β,7α 二羟基-5α-雄烷 17-酮	2685	2777	2767	2862	5α-雄烷-3β,7α,17β-三醇	2692	2654	2688	2716
3β,7β-二羟基-5α-雄烷-17-酮	2798	2910	2883	2998	5α-雄烷-3β,7β,17β-三醇	2836	2844	2833	2868
3β,11β-二羟基 5α-雄烷 17-酮	2849	2968	2932	3043	5α-雄烷 3β,11β,17β-三醇	2854	2864	2851	2887
3β,17β 二羟基-5α-雄烷-6-酮	2899	3024	2984	3100	5α-雄烷-3β,15α,17β-三醇	2846	2811	2833	2849
3β,17β 二羟基-5α-雄烷-7-酮	2860	2956	2948	—	5α-雄烷-3β,16α,17β-三醇	2898	2896	2907	2945

表 18-28 甾醇衍生物保留指数[24]

固定液：OV-1　　柱温：275

化合物	I	化合物	I
24-去甲 5α-胆甾-22-烯-3β 醇	3006	5α 麦角甾 22-烯-3-酮	3178
24-去甲-5α-胆甾-22-烯-3β-酮	2973	5α-麦角甾-24(28)-烯 3β-醇	3256
反 5α-胆甾-22-烯-3β-醇	3130	5α-麦角甾-24(28)-烯-3-酮	3223
反-5α-胆甾-22-烯-3β-酮	3107	5α-麦角甾烷-3β-醇	3264
5-胆甾烯-3β-醇	3156	5α-麦角甾烷-3-酮	3230
4-胆甾烯-3 酮	3205	5,22-豆甾二烯-3β-醇	3283
5α-胆甾烷-3β 醇	3168	4,22-豆甾二烯-3-酮	3331
5α-胆甾烷-3 酮	3145	5α 豆甾 22 烯-3β-醇	3295
5,22-麦角甾二烯 3β 醇	3196	5α-豆甾 22-烯-3-酮	3263
4,22-麦角甾二烯 3β-醇	3245	5-豆甾烯-3β 醇	3337
5α-胆甾 7-烯-3β 醇	3207	4-豆甾烯-3β-酮	3385
5α 胆甾-7-烯-3-酮	3163	5α-豆甾烷-3β-醇	3348
5α-麦角甾-22-烯-3β-醇	3207	5α-豆甾烷-3-酮	3316

表 18-29 甾族化合物（MO-TMS 衍生物）保留指数[46]

固定液：SE-30

柱温/℃ I 化合物	221	231	241	柱温/℃ I 化合物	221	231	241
正二十四烷	2400.0	2400.0	2400.0	雌二醇	2663.2	2674.0	2688.1
雄甾酮	2476.2	2489.3	2511.2	11β-羟基-5β-雄酮	2700.0	2710.2	2723.8
5β 雄酮	2492.7	2504.0	2524.3	正二十七烷	2700.0	2700.0	2700.0
正二十五烷	2500.0	2500.0	2500.0	别孕二醇	2765.6	2777.9	2792.7
脱氢异雄酮	2516.0	2560.6	2580.2	孕二醇	2781.6	2791.4	2803.1
正二十六烷	2600.0	2600.0	2600.0	正二十八烷	2800.0	2800.0	2800.0
孕甾烷醇酮	2629.8	2640.4	2656.0	雌三醇	2886.7	2894.9	2904.2
睾酮	2637.0	2652.6	2672.4	正二十九烷	2900.0	2900.0	2900.0

表 18-30　甾体生物碱保留指数[16]

固定液：CP-Sil 5CB　　柱温：270℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
二十八烷	2800.0	垂茄次碱	3136.8	茄解定	3337.6
5α-胆甾烷	2866.5	茄解定	3151.1	番茄碱	3369.8
搔兰士林	2941.8	豆甾醇	3212.9	三十四烷	3400.0
胆固醇	3068.3	薯蓣皂甙元	3220.4	芥芬胺	3559.4
茄次碱	3129.3	提果皂甙元	3232.4		

表 18-31　TMS-嘧啶碱保留指数[17]

柱温：160℃

I 固定液 / 化合物	OV-101	OV-17	I 固定液 / 化合物	OV-101	OV-17
尿嘧啶	1325.5	1448.4	胸腺嘧啶	1396.7	1507.9
5,6-二氢尿嘧啶	1328.2	1448.0	5,6-二氢胸腺嘧啶	1395.9	1508.0
6-氮尿嘧啶	1449.9	1573.9	6-氮胸腺嘧啶	1459.8	1615.4
5-氟尿嘧啶	1317.9	1420.5	胞嘧啶	1509.6	1696.4
5-溴尿嘧啶	1529.1	1655.2	5-甲基胞嘧啶	1536.3	1706.9
5-碘尿嘧啶	1595.8	1772.9	5-溴胞嘧啶	1615.6	1760.0
5-羟基甲基尿嘧啶	1673.0	1756.8	呋氟尿嘧啶	1318.7	1420.0
5-硝基尿嘧啶	1649.8	1809.6			

表 18-32　TMS-嘌呤碱保留指数[17]

柱温：190℃

I 固定液 / 化合物	OV-101	OV-17	I 固定液 / 化合物	OV-101	OV-17
6-氧嘌呤	1798	2037	鸟嘌呤	2106	2298
6-氨基嘌呤	1849	2073	别嘌呤醇	1611.7	1722.7
黄嘌呤	2010	2261			

表 18-33　尿素衍生物保留指数[27]

固定液	SE-30	OV-17	SE-30+QF-1	OV-101	固定液	SE-30	OV-17	SE-30+QF-1	OV-101
I 柱温/℃ / 化合物	150		130	116	I 柱温/℃ / 化合物	150		130	116
N-叔丁基-N′-甲基脲	1070	1082	1113	—	N-叔丁基-N′,N′-二丙基脲	1155	1158	—	1333
N-叔丁基-N′-丙基脲	1128	1154	1192	—	N-3-三氟甲基苯基-N′-甲基脲	1000	1031	1032	—
N-叔丁基-N′,N′-二甲基脲	1066	1083	1113	1110	N-3-三氟甲基苯基-N′-乙基脲	1014	—	1033	—
N-叔丁基-N′-乙基-N′-甲基脲	1087	1098	1133	1156	N-3-三氟甲基苯基-N′-丙基脲	—	1041	1036	—
N-叔丁基-N′,N′-二乙基脲	1102	1104	1142	1181	N-3-三氟甲基苯基-N′-丁基脲	1024	1042	1044	—

表 18-34　药物保留指数（一）[29]

固定液	Apiezon L			PEG-20M		
柱温与保留指数 / 化合物	t_c/℃	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	t_c/℃	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
2-庚胺	90	862.8	1.8	70	1079.3	2.9
异辛胺	90	923.4	1.4	70	1131.5	4.3
2-甲基氨基庚烷	100	989.9	1.1	70	1129.8	2.1

续表

固定液	Apiezon L			PEG-20M		
柱温与保留指数 / 化合物	t_c/°C	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	t_c/°C	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
甲异辛烯胺	100	1016.3	2.0	70	1212.7	6.1
环戊丙甲胺	100	1076.1	3.9	70	1243.5	11.8
庚胺醇	120	1083.0	1.0	120	1659.0	3.1
去甲氟苯丙胺	120	1091.7	1.5	115	1559.6	3.8
苯基乙基胺	120	1103.1	5.0	120	1604.6	6.5
高氢苯丙胺	120	1102.4	4.8	100	1365.7	8.2
苯丙胺	120	1131.8	5.6	120	1581.2	9.4
高氢苯丁胺	120	1151.8	5.7	100	1358.8	7.2
N-甲基-苯基乙基胺	120	1153.9	4.9	120	1570.9	11.0
苯丁胺	120	1167.7	5.9	120	1572.7	8.9
N,N-二甲基-苯基乙基胺	120	1170.3	4.3	120	1498.4	3.2
环己丙甲胺	120	1179.2	4.8	100	1353.7	8.6
氟苯丙胺	120	1182.9	5.6	120	1530.7	2.1
甲基苯丙胺	120	1187.4	5.0	120	1561.5	6.6
N-甲基-N-炔丙基苄胺	120	1216.1	5.0	130	1648.3	6.3
反苯环丙胺	120	1224.7	10.9	120	1633.7	6.2
乙基苯丙胺	120	1232.7	5.2	120	1571.0	7.7
二甲基苯丙胺	120	1251.4	5.2	120	1567.5	8.8
N-异丙基苯丙胺	120	1252.9	4.9	120	1552.0	7.6
4-苯基-2-氨基丁烷	140	1256.6	5.7	130	1723.7	8.6
苯戊胺	140	1261.3	6.3	130	1648.3	8.3
N-甲基苯丁胺	140	1274.6	5.9	120	1610.8	10.5
辛戊胺	140	1281.4	0.8	100	1372.9	0.5
烯丙苯乙胺	140	1310.9	6.4	140	1813.6	5.0
N-甲基-N-乙基苯丙胺	140	1320.5	4.9	130	1608.6	8.7
N-正丙基苯丙胺	140	1320.3	5.6	120	1633.7	6.1
去甲伪麻黄碱	150	1341.9	4.6	180	2175.5	12.1
去甲麻黄碱	150	1347.3	2.8	180	2194.8	11.4
尼可亭	150	1354.6	7.6	160	1848.0	11.0
2-丁基苯丙胺	150	1355.7	3.9	120	1634.9	6.5
甲氧苯丙甲胺	150	1365.4	4.5	130	1880.4	1.8
N,N-二乙基苯丙胺	150	1370.4	5.5	120	1608.9	9.6
麻黄碱	150	1380.8	4.5	160	2089.1	8.2
氯苯丁胺	160	1394.1	7.8	150	1871.4	11.3
N-甲基-N-丙基苯丙胺	160	1404.6	4.4	140	1673.2	7.5
N-甲基麻黄碱	160	1426.0	6.2	150	2041.7	8.8
N-正丁基苯丙胺	160	1428.0	5.6	130	1732.3	8.4
N-乙基去甲麻黄碱	160	1429.2	5.4	150	2089.3	7.3
N-乙基对氯苯丙胺	160	1456.1	5.7	150	1860.1	10.0
苯甲吗啉	160	1467.6	9.0	150	2064.9	13.8
乙基麻黄碱	160	1476.0	7.9	150	2093.2	8.7
亚甲基二氧苯丙胺	160	1483.5	8.5	160	2204.1	12.6
苯双甲吗啉	160	1485.3	8.9	140	1963.4	11.1
可拉明	160	1486.5	4.0	180	2319.2	12.0
N-甲基-N-丁基苯丙胺	160	1487.8	5.3	130	1742.8	7.6
二乙胺苯丙酮 1.峰	180	1490.3	5.4	150	1965.1	—
2.峰	180	1518.4	6.1	—	—	—

续表

固定液	Apiezon L			PEG 20M		
化合物 \ 柱温与保留指数	t_c/℃	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	t_c/℃	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
N,N-二丙基苯丙胺	180	1533.9	4.3	130	1744.8	9.0
N,N-二丁基苯丙胺	180	1564.9	7.7	150	1901.6	8.1
戊四氮	180	1649.3	7.7	200	2683.1	—
丙苯乙吡咯	180	1650.9	6.0	150	1945.6	11.1
二苯胺	180	1667.9	7.0	190	2516.8	7.8
3,4-二羟亚甲基苯丁胺	180	1680.8	3.5	180	2378.7	14.9
苯乙胺去甲樟烷	230	1747.0	7.3	160	2124.9	—
度冷丁	230	1755.1	7.3	170	2309.7	—
N-苄基苯丙胺	230	1866.3	8.1	190	239.0	27.0
咖啡因	230	1876.8	7.1	220	3002.6	
苄甲苯丙胺	240	1902.3	7.2	190	2391.5	14.1
哌苯甲醇	250	2210.2	9.1	180	2375.5	2.3

表 18-35 药物保留指数（二）[10]

药物		I①	药物		I①
醋硝香豆素	Acenocoumarin	1900	苯胺	Aniline	1150
乙酰丙嗪	Acepromazine	2665	茴香醛	Anisaldehyde	1230
乙酰苯胺	Acetanilide	1365	茴茚二酮	Anisindione	2285
醋奋乃静	Acetophenazine	Neg.	安他唑啉	Antazoline	2330
醋氢可待因酮	Acetyldihydrocodeinone	2450	蒽	Anthracene	1790
			阿扑阿托品	Apoatropine	2025
阿司匹林	Acetylsalicylic acid	1295	阿普比妥	Aprobarbitone	1620
乌头碱	Aconitine	2280	阿托品	Atropine	2175
阿地芬宁	Adiphenine	2190	阿扎环醇	Azacyclonol	2210
氯甲桥萘(艾氏剂)	Aldrin	1950	阿扎培汀	Azapetine	1925
烯丙他明	Aletamine	1280	巴比妥	Barbitone	1495
阿洛巴比妥	Allobarbitone	1600	贝美格	Bemegride	1390
布他比妥	Allylbarbituric acid	1670	贝那替嗪	Benactyzine	2230
阿醋美沙朵	Alphacetylmethadol	2160	苄替啶	Benzethidine	2680
阿法美罗定	Alphameprodine	1840	苯海索	Benzhexol	2230
阿法美沙朵	Alphamethadol	2150	苯佐卡因	Benzocaine	1530
阿法罗定	Alphaprodine	1895	苄非他明	Benzphetamine	1850
倍他唑	Ametazole	1390	苯扎托品	Benztropine	2320
丁卡因	Amethocaine	2215	倍他美罗定	Betameprodine	1830
氨基比林	Amidopyrine	1890	倍他罗定	Betaprodine	1790
对氨水杨酸	p-Aminosalicylic acid	1330	比哌立登	Biperiden	2280
			溴马秦	Bromodiphenhydramine	2150
阿米美啶	Amisometradine	2025	溴苯那敏	Brompheniramine	2070
阿米替林	Amitryptyline	2200	布鲁生	Brucine	3280
阿莫拉酮	Amolanone	2210	布克力嗪	Buclizine	3285
苯丙胺	Amphetamine	1110	蟾毒色胺	Bufotenine	2000
安普托品	Amprotropine	2010	布酚宁	Buphenine	2320
氨基安替比林	Ampyrone	1950			1270
异戊拉明	iso-Amylamine, see Isoamylamine				
异戊巴比妥	Amylobarbitone	1725	布比卡因	Bupivacaine	2270
阿米卡因	Amylocaine	1635	仲丁比妥	Butabarbitone	1655
阿尼利定	Anileridine	2845	布他卡因	Butacaine	2470

续表

药物		I
丁溴比妥	Butallylonal	2025
布坦卡因	Butanilicaine	2010
布替他酯	Butethamate	1740
丁胺卡因	Butethamine	2050
丁巴比妥	Butobarbitone	1660
布替林	Butriptyline	2155
丁酞酯	Butylphthalate	1880
正丁酸	*n*-Butyric acid	1330
咖啡因	Caffeine	1810
樟脑	Camphor	1130
斑蝥素	Cantharidin	1490
癸酸	Capric acid	1485
正己酸	*n*-Caproic acid	1410
卡普托胺	Captodiame	2775
卡拉美芬	Caramiphen	1950
卡马西平	Carbamazepine	2290
卡巴立	Carbaryl	1490
喷托维林	Carbetapentane	2240
卡比马唑	Carbimazole	1670
卡比沙明	Carbinoxamine	2050
卡溴脲	Carbromal	1500
卡立普多	Carisoprodol	1850
胭脂红酸	Carminic acid	1690
卡奋乃静	Carphenazine	3590
氯苯达诺	Chlophedianol	2070
对氯苄对氯苯硫醚	Chlorbenside	2050
氯环力嗪	Chlorcyclizine	2215
氯丹	Chlordane	2020
氯氮䓬	Chlordiazepoxide	2790
		2500②
		2460②
		2300③
氯美噻唑	Chlormethiazole	1230
氯美扎酮	Chlormezanone	2250
氯普鲁卡因	Chloroprocaine	2200
氯吡林	Chloropyrilene	2130
氯喹	Chloroquine	2575
氯麝酚	Chlorothymol	1510
氯苯甘油氨酯	Chlorphenesin carbamate	1690
氯苯那敏	Chlorpheniramine	2000
氯苯沙明	Chlorphenoxamine	2040
对氯苯丁胺	Chlorphentermine	1320
氯丙嗪	Chlorpromazine	2440
氯磺丙脲	Chlorpropamide	1740
氯普噻吨	Chlorprothixene	2510
氯唑沙宗	Chlorzoxazone	1710
胆固醇	Cholesterol	3015
辛可卡因	Cinchocaine	2690
辛可尼丁	Cinchonidine	2625
辛可宁	Cinchonine	2575
克立咪唑	Clemizole	2680
氯贝丁酯	Clofibrate	1560
可卡因	Cocaine	2180
可待因	Codeine	2385
可他宁	Cotarnine	1780
可替宁	Cotinine	1670
环扁桃酯	Cyclandelate	1900
赛克力嗪	Cyclizine	2010
环己巴比妥	Cyclobarbitone	1950
环美卡因	Cyclomethycaine	2225
环喷他明	Cyclopentamine	1080
环喷托酯	Cyclopentolate	2010
苯环戊胺	Cypenamine	1345
赛庚啶	Cyproheptadine	2355
氨苯砜	Dapsone	2860
地普托品	Deptropine	2590
地昔帕明	Desipramine	2260
去甲氯丙嗪	Desmethylchlorpromazine	2480
地索吗啡	Desomorphine	2275
地塞米松	Dexamethasone	2950
右奥沙屈	Dexoxadrol	2340
右美沙芬	Dextromethorphan	2115
右丙氧芬	Dextropropoxyphene	2180
二醋吗啡	Diamorphine	2615
地西泮	Diazepam	2410
敌匹硫磷	Diazinon	1760
二苯西平	Dibenzepin	2480
滴滴涕	Dicophane	2290
双环维林	Dicylomine	2100
二去甲氯丙嗪	Didesmethylchlorpromazine	2480
狄氏剂	Dieldrin	2110
二乙嗪	Diethazine	2280
安非拉酮	Diethylpropion	1480
二乙噻丁	Diethylthiambutene	2000
二乙色胺	Diethyltryptamine	1900
双氢可待因	Dihydrocodeine	2365
二氢可待因酮	Dihydrocodeinone	2425
双氢麦角胺	Dihydroergotamine	2310
双氢吗啡	Dihydromorphine	2440
茶苯海明	Dimenhydrinate	1840
二甲茚定	Dimethindene	2270
地美索酯	Dimethoxanate	2030
3,4-二甲氧基苯乙胺	3,4-Dimethoxyphenethylamine	1540
二甲林	Dimethrin	1210
N,*N*-二甲苯丙胺	*N*,*N*-Dimethylamphetamine	1230

续表

药　　物		$I^{①}$	药　　物		$I^{①}$
N,N-二甲苯乙胺	N,N Dimethylphenethylamine	1150	胍乙啶	Guanethidine	Neg.
二甲噻丁	Dimethylthiambutene	1870	氟哌啶醇	Haloperidol	2940
二甲色胺	Dimethyltryptamine	1750	去氢骆驼蓬碱	Harmine	2280
4，6-二硝基-邻甲酚	4,6-Dinitro-o-cresol	1620	环庚比妥	Heptabarbitone	2100
2，4-二硝基苯酚	2，4-Dinitrophenol	1510	六氯酚	Hexachlorophane	2795
二苯茚酮	Diphenadione	2910	乌洛托品	Hexamine	1210
苯海拉明	Diphenhydramine	1855	海索比妥	Hexobarbitone	1850
二苯拉林	Diphenylpyraline	2090	己烷雌酚	Hexestrol	2400
地匹哌酮	Dipipanone	2470	海克卡因	Hexylcaine	1950
多巴胺	Dopamine	2150	马尿酸	Hippuric acid	1730
多沙普仑	Doxapram	2875	组胺	Histamine	1500
多西拉敏	Doxylamine	1925	后马托品	Homatropine	2045
达克罗宁	Dyclonine	1640	肼屈嗪	Hydralazine	1530
依克替脲	Ectylurea	1360	北美黄连碱	Hydrastine	2975
恩布拉敏	Embramine	2150	白毛茛分碱	Hydrastinine	1590
恩环氨酯	Emcyclamate	1090	氢可酮	Hydrocodone	2425
麻黄碱	Ephedrine	1350	氢吗啡酮	Hydromorphone	2490
麦角克碱	Ergocristine	2500	羟异戊巴比妥	Hydroxyamylobarbitone	1930
麦角环肽	Ergocryptine	2180	羟氯喹	Hydroxychloroquine	2860
麦角胺	Ergotamine	2360	羟哌替啶	Hydroxypethidine	2025
乙非君	Etafedrine	1460	奥芬氨酯	Hydroxyphenamate	1740
乙氯维诺	Ethchlorvynol	1030	对羟苯丙酮酸	p-Hydroxyphenylpyruvic acid	1380
炔己蚁胺	Ethinamate	1360	羟奎尼丁	Hydroxyquinidine	2780
炔雌醇	Ethinylestradiol	2710	羟嗪	Hydroxyzine	2840
依索庚嗪	Ethoheptazine	1845	东莨菪碱	Hyoscine	2285
乙氧莫生	Ethomoxane	1975	莨菪碱	Hyoscyamine	2225
普罗吩胺	Ethopropazine	2350	丙米嗪	Imipramine	2220
乙苯妥英	Ethotoin	1800	吲哚美辛	Indomethacin	2690
乙氧喹	Ethoxyquin	2800	异丙烟肼	Iproniazid	1580
依索唑胺	Ethoxzolamide	2550	异戊胺	Isoamylamine	1025
N-乙基苯丙胺	N-Ethylamphetamine	1210	异卡波肼	Isocarboxazid	1960
			异美沙酮	Isomethadone	2125
N-乙基苄胺	N-Ethylbenzylamine	1010	异美汀	Isometheptene	1050
乙基异丁嗪	Ethylisobutrazine	2455	异烟肼	Isoniazid	1630
乙基吗啡	Ethylmorphine	2415	异丙肾上腺素	Isoprenaline	1720
乙甲噻丁	Ethylmethylthiambutene	1935	异丙酰胺	Isopropamide	2060
			环己异丙甲胺	Isopropylhexedrine	1140
依托利定	Etoxeridine	2310	异喹啉	Isoquinoline	1440
乙色胺	Etryptamine	1850	异西喷地	Isothipendyl	2260
尤卡托品	Eucatropine	2000	氯胺酮	Ketamine	1830
芬氟拉明	Fenfluramine	1220	凯托米酮	Ketobemidone	2010
苯甲吗酮	Fenmetramide	1765	拉切辛	Lachesine	1860
芬太尼	Fentanyl	2700	月桂酸	Lauric acid	1600
三氟丙嗪	Fluopromazine	2175	戊四氮	Leptazol	1535
氟奋乃静	Fluphenazine	3045	左洛啡烷	Levallorphan	2340
没食子胺	Gallamine	2700	左美沙芬	Levomethorphan	2230
龙胆酸	Gentisic acid	2350	左啡诺	Levorphanol	2225
格鲁米特	Glutethimide	1825	利多卡因	Lignocaine	1860
			林旦	Lindane	1740

续表

药物		I[①]
顺式亚油酸	*cis*-Linoleic acid	1330
亚麻酸	Linolenic acid	2175
洛贝林	Lobeline	1780
麦角二乙胺	Lysergide	3445
马拉硫磷	Malathion	1900
扁桃酸	Mandelic acid	1500
亚甲基二羟苯丙胺	MDA(Methylenedioxyamphetamine)	1470
美海屈林	Mebhydrolin	2450
美布氨酯	Mebutamate	1865
甲氯芬酯	Meclofenoxate	1740
美克洛嗪	Meclozine	3050
甲芬那酸	Mefenamic acid	2185
美芬新	Mephenesin	1550
美芬新甲氨酯	Mephenesin Carbamate	1570
美芬诺酮	Mephenoxalone	2120
美芬丁胺	Mephentermine	1240
甲哌卡因	Mepivacaine	2075
甲丙氨酯	Meprobamate	1790
美吡拉敏	Mepyramine	2205
三甲氧苯乙胺	Mescaline	1690
美布卡因	Metabutoxycaine	2225
美他沙酮	Metaxalone	2180
美沙酮	Methadone	2170
美沙酮(环代谢物)	Methadone(cyclic metabolite)	2030
美沙芬林	Methaphenilene	1980
美沙吡林	Methapyrilene	1970
甲喹酮	Methaqualone	2180
美沙比妥	Metharbitone	1470
甲地嗪	Methdilazine	2470
甲巯咪唑	Methimazole	1550
美噻吨	Methixene	2490
美索巴莫	Methocarbamol	1510
美索比妥	Methohexitone	1760
美芬妥英	Methoin	1795
左美丙嗪	Methotrimeprazine	2515
甲氧明	Methoxamine	1720
甲氧滴滴涕	Methoxychlor	2410
甲氧那明	Methoxyphenamine	1360
甲氧丙嗪	Methoxypromazine	2500
甲琥胺	Methsuximide	1595
甲氨甲庚烷	Methylaminomethylheptane	1000
甲基苯丙胺	Methylamphetamine	1170
甲地索啡	Methyldesorphine	2290
甲二氢吗啡	Methyldihydromorphine	2375
甲二甲氧基苯丙胺	Methyldimethoxyamphetamine, see STP	
亚甲基二羟苯丙胺	Methylenedioxyamphetamine, see MDA	
甲麻黄碱	Methylephedrine	1400
哌甲酯	Methylphenidate	1780
甲苯比妥	Methylphenobarbitone	1920
水杨酸甲酯	Methylsalicylate	1200
甲睾酮	Methyltestosterone	2610
甲乙哌酮	Methyprylone	1505
美西麦角	Methysergide	3050
美托酮	Metopon	2375
甲硝唑	Metronidazole	1590
莫达林	Modaline	1420
6-单乙酰吗啡	6-Monoacetylmorphine	2480
吗哌利定	Morpheridine	2500
吗啡	Morphine	2435
豆蔻酸	Myristic acid	1740
烯丙吗啡	Nalorphine	2570
萘甲唑林	Naphazoline	2090
尼亚拉胺	Nialamide	1500*
烟酰胺	Nicotinamide	1460
尼古丁	Nicotine	1340
烟醇	Nicotinyl alcohol	1150
醋硝香豆素	Nicoumalone	1770
尼芬那宗	Nifenazone	1600
尼可刹米	Nikethamide	1500
硝西泮	Nitrazepam	2675
对硝甲苯丙胺	*p*-Nitromethylamphetamine	1655
异炔诺酮	Norethynodrel	2520
去甲芬氟拉明	Norfenfluramine	1130
去甲美沙酮	Normethadone	2080
去甲哌替啶	Norpethidine	1745
去甲伪麻黄碱	Norpseudoephedrine	1310
去甲替林	Nortriptyline	2215
那可丁	Noscapine	3100
制霉菌素	Nystatin	1960
奥芬那君	Orphenadrine	1925
奥沙西泮	Oxazepam	2335
羟考酮	Oxycodone	2425
羟甲唑啉	Oxymetazoline	2170
羟吗啡酮	Oxymorphone	2520
奥昔哌汀	Oxypertine	2125
羟苄利明	Oxyphencyclimine	2540
金雀花碱(厚果碱)	Pachycarpine	1765
棕榈酸	Palmitic acid	1975
罂粟碱	Papaverine	2805
对乙酰氨基酚	Paracetamol	1710
对硫磷(1605,E605)	Parathion	1925

续表

药　　物		$I^{①}$	药　　物		$I^{①}$
帕吉林(优降宁)	Pargyline	1200	哌泊溴烷	Pipobroman	2200
哌卡嗪	Pecazine	2550	哌苯甲醇	Pipradrol	2150
五氯酚	Pentachlorophenol	1740	普莫卡因	Pramoxine	2305
喷他喹	Pentaquine	2540	普尼拉明	Prenylamine	2540
喷他佐辛	Pentazocine	2265	丙胺卡因	Prilocaine	1845
戊巴比妥	Pentobarbitone	1750	伯氨喹	Primaquine	2320
奋乃静	Perphenazine	2200	扑米酮	Primidone	2250
哌替啶	Pethidine	1740	普罗比妥	Probarbital	1550
非那卡因	Phenacaine	2615	丙磺舒	Probenecid	2320
非那西丁	Phenacetin	1660	普鲁卡因胺	Procainamide	2230
苯吗庚酮	Phenadoxone	2510	普鲁卡因	Procaine	1995
菲	Phenanthrene	1780	丙卡巴肼	Procarbazine	1990
非那佐辛	Phenazocine	2670	丙氯拉嗪	Prochlorperazine	2935
安替比林	Phenazone	1830	丙环定	Procyclidine	2115
非那吡啶	Phenazopyridine	2345	黄体酮	Progesterone	2785
苯环利定	Phencyclidine	1870	丙嗪	Promazine	2295
苯甲曲秦	Phendimetrazine	1440	异丙嗪	Promethazine	2260
苯乙肼	Phenelzine	1340	丙胺太林	Propantheline	2350
α-苯乙胺	α-Phenethylamine	1010	丙哌利定	Properidine	1740
β-苯乙胺	β-Phenethylamine	1120	丙酰马嗪	Propiomazine	2725
苯丁酰脲	Pheneturide	1450	丙氧卡因	Propoxycaine	2320
苯茚胺	Phenindamine	2160	普萘洛尔	Propranolol	2145
苯异丙肼	Pheniprazine	1410	N-丙苯丙胺	N-Propylamphetamine	1330
非尼拉敏	Pheniramine	1805	丙己君	Propylhexedrine	1170
芬美曲秦	Phenmetrazine	1430	5-丙基-5-异丁巴比妥酸	5-Propyl-5-isobutylbarbituric acid	1690
苯巴比妥	Phenobarbitone	1950	丙硫喷地	Prothipendyl	2330
吩噻嗪	Phenothiazine	2010	普罗托醇	Protokylol	1500
酚苄明	Phenoxybenzamine	2230	普罗替林	Protriptyline	2230
苯氧丙肼	Phenoxypropazine	1465	伪麻黄碱	Pseudoephedrine	1350
苯丙氨酯	Phenprobamate	1520	吡乙吩噻嗪	Pyrathiazine	2520
苯琥胺	Phensuximide	1640	吡多胺	Pyridoxamine	2000
芬特明	Phentermine	1150	乙胺嘧啶	Pyrimethamine	2140
保泰松	Phenylbutazone	2370	吡咯他敏	Pyrrobutamine	2430
苯丙醇胺	Phenylpropanolamine	1310	司可巴比妥	Quinalbarbitone	1775
水杨酸苯酯(萨罗)	Phenylsalicylate	1740	奎尼丁	Quinidine	2760
苯托沙敏	Phenyltoloxamine	1925	奎宁	Quinine	2755
非尼拉朵	Phenyramidol	2000	喹啉	Quinoline	1440
苯妥英	Phenytoin	2335	异喹啉	*iso*-Quinoline, see Isoquinoline	
福尔可定	Pholcodine	2380	喹脲铵	Quinuronium	2100
毒扁豆碱	Physostigmine	1810	间苯二酚	Resorcinol	1610
印防己毒素	Picrotoxin	2205	鱼藤酮	Rotenone	3250
毛果芸香碱	Pilocarpine	2010	水杨酰胺	Salicylamide	1460
匹哌马嗪	Pipamazine	3260	水杨酸	Salicylic acid	1330
匹哌氮酯	Pipazethate	2010	血根铵	Sanguinarine	2880
哌立度酯	Piperidolate	2325	山道年	Santonin	2160
哌罗卡因	Piperocaine	1955	仲丁比妥	Secbutobarbitone	1780
哌罗克生	Piperoxan	1830	司巴丁	Sparteine	1770
哌沙酯	Pipethanate	2470			

续表

药物		I①	药物		I①
硬脂酸	Stearic acid	2175	麝香草酚	Thymol	1270
己烯雌酚	Stilboestrol	2300	莫西赛利	Thymoxamine	1830
同 292	STP(Methyldimethoxyamphetamine)	1620	妥拉磺脲	Tolazamide	1650
士的宁	Strychnine	3040	妥拉唑林	Tolazoline	1550
司替氨酯	Styramate	1670	甲苯磺丁脲	Tolbutamide	1690
舒砜那	Sulphonal	1475	反苯环丙胺	Tranylcypromine	1210
他克林	Tacrine	2140	曲安西龙	Triamcinolone	3070
他布比妥	Talbutal	1700	三氟拉嗪	Trifluoperazine	2680
四氢大麻酚	Tetrahydrocannabinol	2455	三氟丙嗪	Triflupromazine	2210
四氢唑林	Tetrahydrozoline	1960	三甲利定	Trimeperidine	1830
醋氢可酮	Thebacon	2500	阿利马嗪	Trimeprazine	2320
蒂巴因	Thebaine	2525	甲氧苄啶	Trimethoprim	2610
西尼二胺	Thenyldiamine	2010	曲米帕明	Trimipramine	2200
可可碱	Theobromine	1840	曲吡那敏	Tripelennamine	1960
茶碱	Theophylline	1485	曲普利啶	Triprolidine	2250
噻苯达唑	Thiabendazole	2010	莨菪醇(托品)	Tropine	1200
硫戊比妥	Thiamylal	1890	三甲双酮	Troxidone	1100
苯噻妥英	Thiantoin	2145	色胺	Tryptamine	1740
硫乙拉嗪	Thiethylperazine	3260	泰巴氨酯	Tybamate	1700
硫喷妥	Thiopentone	1850	泰马唑啉	Tymazoline	1850
醋酸奋乃静	Thiopropazate	3450	戊烯比妥	Vinbarbitone	1750
硫利达嗪	Thioridazine	3110	华法林	Warfarin	1460
硫代水杨酸	Thiosalicylic acid	1500	珍尼柳酯	Xenysalate	2440
替沃噻吨	Thiothixene	3015	赛洛唑啉	Xylometazoline	1920
松齐拉敏	Thonzylamine	2200	育亨宾	Yohimbine	3230
			氯苯唑胺	Zoxazolamine	1625

①固定液为 SE-30;柱温多数为 230℃。

②主要分解物。

第三节　氨基酸与氨基醇类化合物的保留指数

表 18-36　氨基酸（TMS 衍生物）保留指数（一）[45]

固定液：SE-54

化合物 \ 柱温/℃ (I)	85	120	150	190	化合物 \ 柱温/℃ (I)	85	120	150	190
丙氨酸	1110.27	—	—	—	苯丙氨酸	—	1635.10	—	—
缬氨酸	1127.77	—	—	—	精氨酸	—	1638.81	—	—
亮氨酸	1287.56	—	—	—	谷氨酸	—	1647.08	—	—
脯氨酸	1304.19	—	—	—	天冬酰胺	—	1662.50	—	—
异亮氨酸	1309.25	—	—	—	天冬酰胺	—	1697.85	—	—
甘氨酸	1316.87	—	—	—	谷氨酰胺	—	—	1762.35	—
丝氨酸	1388.23	—	—	—	谷氨酰胺	—	—	1794.37	—
苏氨酸	—	1404.11	—	—	组氨酸	—	—	1942.25	1941.81
精氨酸	—	1467.67	—	—	赖氨酸	—	—	1947.43	1941.81
蛋氨酸		1531.10		—	酪氨酸	—	—	1960.08	1959.22
天冬氨酸	—	1543.89	—	—	色氨酸	—	—	—	2237.31
半胱氨酸	—	1574.31	—	—	半胱氨酸-半胱氨酸	—	—	—	2327.19

表 18-37 氨基酸（TMS 衍生物）保留指数（二）[45]

固定液：SP-2100

柱温/℃ I 化合物	90	135	150	210	柱温/℃ I 化合物	90	135	150	210
丙氨酸	1106.11	—	—	—	苯丙氨酸		1622.47	1624.82	—
缬氨酸	1225.60			—	谷氨酸	—	1634.25	1629.40	—
亮氨酸	1284.85	—	—	—	天冬酰胺	—	1664.12	1660.13	—
脯氨酸	1296.99	—	—		天冬酰胺	—	1680.55	1676.14	—
异亮氨酸	1306.52	—	—	—	谷氨酰胺	—	1773.65	1768.75	—
甘氨酸	1315.88	—	—	—	谷氨酰胺	—	1784.83	1780.34	—
丝氨酸	1383.95	—	—	—	组氨酸	—	—	1916.60	1921.05
苏氨酸	—	1400	1400		酪氨酸	—	—	1949.42	1950.38
精氨酸	—	1448.37	1451.46	—	赖氨酸	—	—	1953.89	1950.38
蛋氨酸		1516.78	1518.48	—	色氨酸	—	—	—	2218.50
天冬氨酸	—	1531.51	1528.16	—	半胱氨酸-半胱氨酸	—	—	—	2314.22
半胱氨酸	—	1563.23	1562.44	—					

表 18-38 氨基酸（TMS 衍生物）保留指数（三）[45]

固定液：Carbowax 20M

柱温/℃ I 化合物	75	135	160	200	柱温/℃ I 化合物	75	135	160	200
丙氨酸	1206.10				蛋氨酸	—	1741.00	—	—
缬氨酸	1289.72	—	—	—	谷氨酰胺	—	1786.61	—	—
亮氨酸	1358.58	—	—	—	谷氨酸	—	1800	—	—
甘氨酸	1364.90	—	—	—	苯丙氨酸	—	1863.65	1863.83	—
异亮氨酸	1369.55	—	—	—	赖氨酸	—	1971.52	1944.21	—
脯氨酸	1396.61	—	—	—	天冬酰胺	—	—	2028.71	—
苏氨酸	1469.26	—	—	—	酪氨酸	—	—	2151.59	—
丝氨酸	1476.09	—			谷氨酰胺	—	—	2165.40	—
天冬酰胺	—	1653.32	—	—	组氨酸	—	—	—	2293.85
天冬氨酸	—	1683.85	—	—	半胱氨酸-半胱氨酸	—		—	2537.21
半胱氨酸	—	1703.19	—	—	色氨酸	—	—	—	2548.52
精氨酸	—	1726.72		—					

表 18-39 蛋白质氨基酸（TMS-MTH 衍生物）保留指数[56]

固定液	SE 30			OV-17		
柱温/℃ I 化合物	140	180	220	140	180	220
丙氨酸	1491	—	—	1724	—	—
缬氨酸	1561	—	—	1757	—	—
S-羧甲基半胱氨酸	1546	—	—	1773	—	—
异亮氨酸	1649	—	—	1837	—	—
亮氨酸	1658	—	—	1857	—	—
Δ-苏氨酸	1582	—	—	1905	—	—
脯氨酸	1543	—	—	1905	—	—
甘氨酸	1161	—	—	1764	—	—
天冬氨酸	—	1896	—	—	2140	—
蛋氨酸	—	1912	—	—	2203	—
谷氨酸	—	2016	—	—	2246	—
苯丙氨酸	—	2005	—	—	2307	—
天冬酰胺	—	2016	—	—	2307	—
谷氨酰胺	—	2154	—	—	2447	—
酪氨酸	—	—	2343	—	—	2616
组氨酸	—	—	2298	—	—	2645
ε-MTC 赖氨酸	—	—	2326	—	—	2721
色氨酸	—	—	2631	—	—	2926

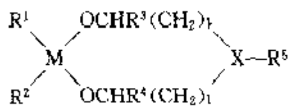
表 18-40 氨基酸保留指数[23]

柱温：250℃

化合物 \ 固定液 I	OV-101	OV-17	化合物 \ 固定液 I	OV-101	OV-17
色胺	1938	2197	5 甲氧基-*N*-ω 乙酰基色胺	2396	2869
N-ω 甲基色胺	2075	2279	*N*ω,*N*-ω二乙基色胺	2452	2223
5-羟基色胺	2186	2415	左旋色氨酸	2162	2330
5-甲氧基色胺	2136	2447	消旋-5-羟基色氨酸	2385	2520

表 18-41 氨基醇（硅、硼衍生物）保留指数[47]

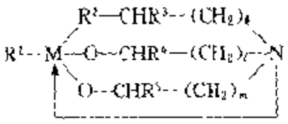
柱温：200℃

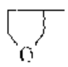
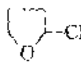
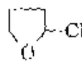
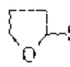
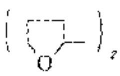


M	X	k	l	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	Apiezon L	OV-225
Si	O	1	1	C_6H_5	CH_3	H	H	—	1557	2127
Si	O	1	1	C_6H_5	C_3H_7	H	H	—	1700	2232
Si	O	1	1	C_6H_5	C_6H_5	H	H	—	2110	2838
Si	N	1	1	CH_3	CH_3	H	H	C_6H_5	1724	2247
Si	N	1	1	C_6H_5	CH_3	H	H	CH_3	1632	2160
Si	N	1	1	C_6H_5	CH_3	H	H	C_6H_5	2260	3020
Si	N	1	1	C_6H_5	CH_3O	H	H	CH_3	1701	2370
Si	N	1	1	C_6H_5	C_2H_5O	H	H	CH_3	1711	2289
Si	N	1	1	C_6H_5	C_2H_5O	H	H	CH_3	2182	3015
Si	N	1	1	C_6H_5	C_6H_5	H	H	CH_3	2179	2921
Si	N	1	1	C_6H_5	C_6H_5	H	H	C_2H_5	2219	2957
Si	N	1	1	C_6H_5	C_6H_5	H	H	C_3H_7	2277	2986
Si	N	1	1	C_6H_5	C_6H_5	H	H	C_4H_9	2357	3076
Si	N	1	1	C_6H_5	C_6H_5	H	H	$C(CH_3)_3$	2353	3066
Si	N	1	1	C_6H_5	C_6H_5	H	H	C_6H_5	2750	3649
Si	N	1	1	C_6H_5	C_6H_5	H	H	NH_2	2179	3098
Si	N	1	1	*p*-CH_3-C_6H_4	*p*-CH_3-C_6H_4	H	H	CH_3	2350	3081
Si	N	1	1	C_6H_5	CH_3	CH_3	H	CH_3	1609	2089
Si	N	1	1	C_6H_5	C_6H_5	CH_3	H	CH_3	2148	2842
Si	N	1	1	C_6H_5	C_6H_5	CH_3	CH_3	CH_3	2127	2755
B	N	1	1	C_6H_5	—	H	H	CH_3	1913	3313
B	N	1	1	C_6H_5	—	H	H	$C(CH_3)_3$	1944	3076
B	N	1	1	C_6H_5	—	CH_3	CH_3	CH_3	1886	3141
B	N	1	2	C_6H_5	—	H	H	CH_5	2061	3330
B	N	2	2	C_6H_5	·	H	H	CH_3	2054	3253

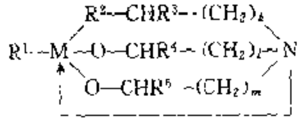
表 18-42　氨基醇衍生物保留指数[38]

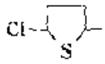
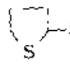
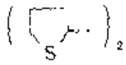
柱温：200℃



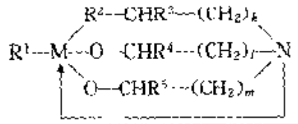
M	k	l	m	R¹	R²	R³	R⁴	R⁵	Apiezon L	OV-225
B	1	1	1	—	O	H	H	H	1745	3041
B	1	1	1	—	O	CH_3	H	H	1716	2952
B	1	1	1	—	O	CH_3	CH_3	H	1672	2837
B	1	1	1	—	O	CH_3	CH_3	H	1730①	2938①
B	1	1	1	—	O	CH_3	CH_3	CH_3	1632①	2726
B	1	1	1	—	O	CH_3	CH_3	CH_3	1694①	2836
B	2	1	1	—	O	H	H	H	1770	3104
B	2	2	1	—	O	H	H	H	1854	2984
B	2	2	2	—	O	H	H	H	1844	2808
Si	1	1	1	H	O	H	H	H	1437	2597
Si	1	1	1	CH_3	O	H	H	H	1387	2142
Si	1	1	1	C_6H_5	O	H	H	H	2212	3171
Si	1	1	1	CH_2=CH	O	H	H	H	1522	2463
Si	1	1	1	*p*-Cl-C_6H_4	O	H	H	H	2343	3547
Si	1	1	1	α $C_{10}H_7$	O	H	H	H	2718	4125
Si	1	1	1		O	H	H	H	1996	3317
Si	1	1	1		O	H	H	H	1980	3029
Si	1	1	1	 -CH_2	O	H	H	H	1963	3097
Si	1	1	1	 -CH_2—CH_2	O	H	H	H	2020	2953
Si	1	1	1	$(C_2H_5)_3$Si—CH_2—CH_2	O	H	H	H	2179	2824
Si	1	1	1	 —Si$(CH_3)_2$—CH_2—CH_2	O	H	H	H	2132	2988
Si	1	1	1	 Si(CH_3)—CH_2—CH_2	O	H	H	H	2473	3537
Si	1	1	1	 Si—CH_2—CH_2	O	H	H	H	2778	4068
Si	1	1	1	 -Si$(CH_3)_2CH_2$—CH_2	O	H	H	H	2032	3002
Si	1	1	1		O	H	H	H	2158	3440
Si	1	1	1		O	H	H	H	2149	3320

续表



I 化合物 \ 固定液									Apiezon L	OV-225
M	*k*	*l*	*m*	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5		
Si	1	1	1		O	H	H	H	2386	3918
Si	1	1	1	 $-Si(CH_3)_2-CH_2-CH_2$	O	H	H	H	2396	3327
Si	1	1	1	 $Si(CH_3)-CH_2-CH_2$	O	H	H	H	2946	4136
Si	1	1	1	$(C_6H_5)_2Si(CH_3)CH_2CH_2$	O	H	H	H	2931	4052
Si	1	1	1	H	O	CH_3	CH_3	CH_3	1569[①]	2764
Si	1	1	1	H	O	CH_3	CH_3	CH_3	1618[①]	2869
Si	1	1	1	CH_3	O	CH_3	H	H	1380	2077
Si	1	1	1	CH_3	O	CH_3	CH_3	H	1357	2004
Si	1	1	1	CH_3	O	H	H	H	1381	2041
Si	2	1	1	$CH_2=CH$	O	H	H	H	1567	2109
Si	2	1	1	$Cl-CH_2$	O	H	H	H	1826	2722
Si	2	1	1	C_6H_5	O	H	H	H	2082	2945
Si	2	1	1	*p*-Br—C_6H_4	O	H	H	H	2383	3339
Si	2	1	1	*p*-Cl—C_6H_4	O	H	H	H	2260	3212
Si	2	1	1	$CH_2=CH$	O	H	CH_3	CH_3	1542	2071
Si	2	1	1	C_6H_5	O	H	CH_3	CH_3	2025	2766
Si	2	1	1	*p*-Br—C_6H_5	O	CH_3	CH_3	CH_3	2344[①]	3140
Si	2	1	1	*p*-Br—C_6H_5	O	CH_3	CH_3	CH_3	2344[①]	3166
Si	2	1	1	*p*-Cl—C_6H_5	O	H	CH_3	CH_3	2253	3004
Ge	1	1	1	C_6H_5	O	H	H	H	1274	3487
Ge	1	1	1	α-$C_{10}H_7$	O	H	H	H	2833	4264
Ge	1	1	1		O	H	H	H	2299	3606
Ge	1	1	1	C_6H_5	O	CH_3	CH_3	CH_3	2097	3070
Ge	1	1	1	C_6H_5	O	CH_3	CH_3	CH_3	2124	3104
Si	1	1	1	CH_3	O	CH_3	CH_3	CH_3	1365[①]	1928
Si	1	1	1	CH_3	O	CH_3	CH_3	CH_3	1365[①]	1955
Si	1	1	1	CH_3	O	C_6H_5	H	H	2171	2889
Si	1	1	1	CH_3	O	C_6H_5	C_6H_5	H	2779[①]	3544
Si	1	1	1	CH_3	O	C_6H_5	C_6H_5	H	2779[①]	3570
Si	1	1	1	CH_3	O	C_6H_5	C_6H_5	H	2779[①]	3621
Si	1	1	1	C_6H_5	O	CH_3	H	H	2075	3155
Si	1	1	1	C_6H_5	O	CH_3	CH_3	H	2038	3052
Si	1	1	1	C_6H_5	O	CH_3	CH_3	H	2067[①]	3082[①]
Si	1	1	1	C_6H_5	O	CH_3	CH_3	CH_3	1991	2945
Si	1	1	1	C_6H_5	O	CH_3	CH_3	CH_3	2022	2980
Si	1	1	1	C_6H_5	O	C_6H_5	C_6H_5	H	3253	4595

续表

化合物 \ I \ 固定液									Apiezon L	OV-225
										
M	k	l	m	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5		
Si	1	1	1	$CH_2{=}CH$	O	C_6H_5	H	H	2353	3185
Si	1	1	1	$CH_2{=}CH$	O	C_6H_5	C_6H_5	H	2916①	3849①
Si	1	1	1	$CH_2{=}CH$	O	C_6H_5	C_6H_5	H	2916①	3876①
Si	1	1	1	CH_3	CH_2	H	H	H	1425	1909
Si	1	1	1	C_6H_5	CH_2	H	H	H	2089	2888
Si	2	1	1	CH_3	O	H	H	H	1537	2103
Ge	1	1	1	C_6H_5	O	C_6H_5	H	H	2816	4116
Ge	1	1	1	C_6H_5	O	C_6H_5	C_6H_5	H	3339	4793
Ge	2	1	1	C_6H_5	O	H	H	H	2298	3364
Ge	2	1	1	α-$C_{10}H_7$	O	H	H	H	2839	4110
Sn	1	1	1	$(CH_3)_3Si{-}CH_2$	O	H	H	H	1689	2695

①由于立体异构物色谱峰未分开，可使测定结果产生约10iu误差。

第四节 精油组分与萜烯类化合物的保留指数

表 18-43 精油组分的保留指数（一）[44]

固定液：OV-101

化合物 \ I \ 柱温/℃	130	140	150	160	170	化合物 \ I \ 柱温/℃	130	140	150	160	170
α-蒎烯	952	956	960	965	—	樟脑	—	1153	1159	1166	1173
莰烯	968	974	979	984	—	熏衣草花醇	—	1159	1161	1163	1165
β-蒎烯	993	999	1004	1009	—	龙脑	—	1171	1178	1184	1191
对伞花烃	1026	1029	1032	1036	—	4-松油醇	—	1180	1186	1192	1197
顺罗勒烯	1027	1028	1029	1030	—	α-松油醇	—	1190	1195	1201	1206
柠檬烯	1036	1040	1045	1049	—	里哪醇乙酸酯	—	1243	1244	1245	1246
1,8-桉叶油素	1039	1045	1050	1055	—	熏衣草醇乙酸酯	—	1273	1274	1275	1276
反罗勒烯	1040	1041	1042	1043	—	石竹烯	—	1427	1434	1442	1449
里哪醇	—	1092	1093	1095	1097						

表 18-44 精油组分的保留指数（二）[40]

固定液：Carbowax 1500

化合物 \ I \ 柱温/℃	120	130	140	150	160	170	180	化合物 \ I \ 柱温/℃	120	130	140	150	160	170	180
α-蒎烯	1057	1065	1072	1079	—	—	—	里哪醇乙酸酯	—	—	—	1582	1582	1583	1582
莰烯	1110	1117	1124	1131	—	—	—	樟脑	—	—	—	1593	1605	1617	1630
β-蒎烯	1150	1158	1167	1175	—	—	—	熏衣草醇乙酸酯	—	—	—	1632	1631	1630	1628
柠檬烯	1230	1236	1242	1249	—	—	—	4-松油醇	—	—	—	1643	1647	1651	1654
顺罗勒烯	1241	1242	1243	1245	—	—	—	石竹烯	—	—	—	1642	1655	1668	1681
反罗勒烯	1264	1265	1268	1270	—	—	—	熏衣草花醇	—	—	—	1709	1705	1702	1698
1,8-桉叶油素	1258	1266	1273	1281	—	—	—	α-松油醇	—	—	—	1730	1734	1738	1741
对伞花烃	1299	1305	1311	1318	—	—	—	龙脑	—	—	—	1736	1744	1751	1758
里哪醇	—	—	—	1564	1561	1557	1553								

表 18-45　精油组分的保留指数（三）[44]

固定液：QF-1

化合物 \ I \ 柱温/℃	90	100	120	130	150	160	180
α-蒎烯	976	983	997	1004	—	—	—
莰烯	1010	1017	1031	1037	—		—
β-蒎烯	1041	1048	1063	1069	—	—	—
柠檬烯	1072	1078	1089	1095	—	—	—
顺罗勒烯	1075	1076	1078	1079	—	—	—
反罗勒烯	1104	1105	1107	1108	—	—	·
对伞花烃	1109	1114	1124	1129	—		—
1,8-桉叶油素	1130	1137	1150	1156	—	—	—
里哪醇	—	—	1239	1242	1248	1251	—
4-松油醇	—	—	1350	1357	1368	1374	—
熏衣草花醇	—	—	1351	1356	1365	1369	—
龙脑	—	—	1376	1387	1407	1418	—
α-松油醇	—	—	1380	1386	1397	1403	—
里哪醇乙酸酯	—	—	—	—	1452	1455	1461
熏衣草醇乙酸酯	—	—	—	—	1506	1510	1517
樟脑	—	—	—	—	1540	1555	1586
石竹烯	—	—	—	—	1556	1567	1588

表 18-46　萜烯保留指数[2]

固定液	Apiezon L	SF-96	SE-30	DC-710	QF-1	Carbowax 20M			DEGS
化合物 \ I \ 柱温/℃	155	170	130	165	132		165	205	160
华滑茄油烯	1368	—	—	—	—	—	—	—	—
α-长蒎烯	·	—	1359.5	—	—	—	—	—	—
α-衣兰烯	1401.5	1396.1	-	1454.5	—	—	1538.5		1653
β-榄香烯	1410	—	—	—	—	-	—	-	—
α-波旁烯	1410	—	—	—	—	—	—	—	—
α-珩玘烯	1410.2	1400.5	1378.5	1459	1447	1521.5	1551.3	1593	1665
环酒剔烯	1411.9	1399.7	—	—	—	—	1549	—	(1684)
环珩玘莰烯	1417.8	—	—	—	1467.2	—	1555.4	—	1685.6
β-波旁烯	1418.3	1411.7	1386	1477.3	1477.5	1547	1586.5	1618	1714
β-法呢烯	1429.2	—	—	—	1509	—	1668		1818.5
酒剔烯	1134.7	1420.7	—	—	—	—	1594.5	—	(1738)
莎草烯	1446.6	1432.5	1398	1501	1493	1562	1606	1650	1736.5
α-龙脑胶萜烯	—	1435.2	1413	1500.5	1471	1558	1591	1633	1712.5
石竹烯	1451.7	1445.3	1417.5	1523	(1587)	1618.5	1655.5	1695.5	1835.5
长叶烯	1464.0	1440.2	1404	1517.5	1520	1600	1643	1697	1802.5
异酒剔烯	1464.4	1440.9	—	—	—	—	1639		(1797)
白菖烯	1466.0	1459.7	1435	1535.5	1513	1618	1655.5	1700	1806
β-衣兰烯	—	—	~1417.5	—	—	—	—	—	—
β-珩玘烯	—		~1422.5	—		—	—	—	—
α-雪松烯	1473.4	1445.0	~1414	1516	1518	1597.5	1640	1689	1788.5
罗汉柏烯	1476.1	1458.3	1430.5	1542.3	1540	1643	1684.2	1732	1858.5
香橙烯	~1477	—	—	—	—	—	—	—	—
α-马阿里烯	~1477	·	—	—	··	—	—	—	—
γ-姜黄烯	1481.9		—	—	1532.5	—	·	—	—

续表

固 定 液	Apiezon L	SF-96	SE 30	DC-710	QF-1	Carbowax 20M			DEGS
I 柱温/°C 化合物	155	170	130	165	132		165	205	160
β-雪松烯	1482.4	1454.8	1421	1533.5	1539.5	1624.5	1670	1714	1834.5
α-姜黄烯	1483	1480.4	(1475)	1589	1557.5	—	1787.5	(1814)	1992.5
ε-依兰油烯	1484.8	(1474.0)	(1445)	(1561.5)	1552.5	(1675.5)	1713.8	(1759.5)	1893.5
广藿香烯	1487.2	1476.6	1446.8	1561.5	1583.5	1681	1719	1765	1929.5
檀香烯		1470.5	1454	1548	1533.5	1658	1683	1714.5	1843.5
芹子 4(14),7-二烯	1491.9	1475.7	—	—	1542	—	1694	—	1852.5
δ 芹子烯	1504.5	—	—	—	—	—	1728.5	—	—
γ-依兰油烯	1505.7		—	—	1545	—	1725		1889
γ-阿莫夫烯	1506.4	-	—	—	1544.5	—	1724	—	1896.5
α 海马査烯	1508.0	—	1444	1561.5	1533.5	1662.5	1704.5	1755	1870
α-阿莫夫烯	1509.5	1491.7	—	1582.5	1535	—	1724.5	—	1897
兹扎烯	1511.6	1481.8	—	—	1562	—	1706.3	—	1879.5
β-比酒波烯	1512.9	1510.3	1496.5	1592.5	1548	1726	1745.5	1772	1909.5
β-姜黄烯	1513.6	1510.4	—	—	1547.5	—	1756	—	1922.5
α-姜烯	—	(1479.6)	—	1583.5	—	—	1738	(1762)	—
瓦伦烯	1525.6	1508.8	1457	~1600	1581	1725.5	1760	1801	1948
β-海马査烯	1529.7		1491	1607.5	1578	1717	1752.5	1799	-
β-芹子烯	1530.2	1506.3	—	1595	1597.5	—	1766.5	1815.5	1958
γ-没药烯	1531.3	(1505)	—	1601	—	—	1765.5	1815	—
α-依兰油烯	1531.3	1507.7	1495	~1600	1558.5	1726	1752.5	1792	1927.5
α-焦岩兰烯	1533.9	1521.5	—	—	—	—	1817	—	2026.0
α-芹子烯	1534.5	—	—	-	—	—	-	—	—
δ-杜松烯	1546.4	(1526.4)	~1504	1628.5	—	—	1784	1818	1959
菖蒲烯	~1550	—	—	—	—	-	—	—	—
γ 杜松烯	1554.9	1523.5	1506.5	1623.5	1587	1762	1792.3	1835.5	1978.5
芹子-4(14),7(11)-二烯	1572.0	—	—	-	1611.5	—	1816.3	—	(2018)
芹子-3,7(11) 二烯	1580	—	—	-	—	—	—	—	—
β 雪松烯	1583.0	1563.3	-	—	—		1885	—	2111

表 18-47 萜烯衍生物保留指数[4]

固 定 液	PEG-4000	SE-30	固 定 液	PEG-4000	SE-30
I 柱温/°C 化合物	175	160	I 柱温/°C 化合物	175	160
α-蒎烯	1072	970	3,7-二甲基-2-辛烯+3,7-二甲基-3-辛烯	1238	922
(—)-顺蒎烯	1103	1002	α-萜品醇	1698	1205
香叶烯	1182	984	对-8-盖烷醇	1569	1162
2,6-二甲基辛烷	1032	932	对-4(8)-盖烯	1220	998
桉树脑	1280	1127	D 苎烯	1242	1051
香茅醛	1533	1146	D-苎烯氧化物	1562	1148
香茅醇	1765	1225	对-8-盖烯-1-醇	1731	1156
3,7 二甲基-1-辛醇	1685	1190	对-1-盖醇	1650	1156
3,7-二甲基-1-辛烯	1265	963	对-8-盖烯-2-醇	1812	1208
里哪醇乙酸酯	1548	1250	对-2-盖烯醇	1732	1205
里哪醇	1558	1082	对-1-盖烯+对-2-盖烯	1213	985
3,7-二甲基 3 辛醇	1412	1091			

表 18-48 萜烯醇和醇的氨基甲酸酯的保留指数[6]

固定液	DEGA	Apiezon L	固定液	DEGA	Apiezon L
I 柱温/℃ 化合物	160	180	I 柱温/℃ 化合物	160	180
氨基甲酸酯:			正戊醇	1070	2167
(一)烃基莰醇	1500	2573	正己醇	1165	2250
(±)异烃基莰醇	1494	2560	正庚醇	1267	2363
(一)异蒲勒醇	1456	2543	正壬醇	1478	2508
Z 型哪醇氧化物	1396	2512	正癸醇	1568	2590
α-萜品醇	1548	2620	香茅醇	1518	—
4-萜品烯醇	1497	2554			

表 18-49 萜烯醇保留指数[14]

柱温：150℃

I 固定液 化合物	Apiezon L	Carbowax 20M	I 固定液 化合物	Apiezon L	Carbowax 20M
2,6-二甲基-2-辛醇	1067	1449	3,7-二甲基-3-辛醇	1076	1431
2,6-二甲基-7-辛烯-2-醇	1036	1173	3,7-二甲基-1-辛烯-3-醇	1035	1449
2 甲基-6-亚甲基-7-辛烯 2-醇	1084	1631	3,7-二甲基-6-辛烯-3-醇	1104	1537
顺-2,6-二甲基-5,7-辛二烯-2-醇	1115	1660	3,7-二甲基-1,6-辛二烯-3-醇	1064	1555
反 2,6 二甲基 5,7-辛二烯-2-醇	1132	1685			

表 18-50 环己醇、环己酮和萜类化合物的保留指数[5]

柱温：130℃

I 固定液 化合物	PEG-6000 +Hyprose SP 80	Apiezon L	I 固定液 化合物	PEG-6000 +Hyprose SP 80	Apiezon L
环己烷	764	683	2-甲基环己酮	1420	954
甲基环己烷	802	751	3-甲基环己酮	1453	961
异丙基环己烷	1019	958	4-甲基环己酮	1462	968
三丁基环己烷	1089	1025	2-异丙基环己酮	1544	1119
环己醇	1512	878	3-异丙基环己酮	1654	1172
环己酮	1426	888	4-异丙基环己酮	1667	1182
1-甲基环己醇	1415	918	顺 2 三丁基环己酮	1660	1203
顺 2-甲基环己醇	1494	946	反-2-三丁基环己酮	1698	1211
反-2-甲基环己醇	1512	946	顺 4-三丁基环己酮	1783	1225
顺-3 甲基环己醇	1564	964	反-4-三丁基环己酮	1846	1245
反-3-甲基环己醇	1534	964	盖醇	1720	1202
顺-4 甲基环己醇	1536	964	新盖醇	1662	1202
反-4-甲基环己醇	1564	964	新异盖醇	1690	1212
1-异丙基环己醇	1559	1130	异盖醇	1749	1212
顺-2 异丙基环己醇	1627	1139	香芹盖醇	1752	1225
反-2 异丙基环己醇	1694	1139	新香盖醇	1700	1219
顺-3 异丙基环己醇	1773	1173	新异香芹盖醇	1769	1225
反-3-异丙基环己醇	1726	1165	异香芹盖醇	1810	1248
顺 4 异丙基环己醇	1726	1165	反-1-对盖醇	1623	1167
反-4 异丙基环己醇	1773	1173	顺-1-对盖醇	1698	1189
反对盖烷	1060	1017	1-甲基-4-三丁基 3 环己醇	1680	1264
顺对盖烷	1087	1027	盖酮	1558	1273
反 1-甲基-4-三丁基环己烷	1123	1081	异盖酮	1593	1273
顺-1-甲基-4 三丁基环己烷	1152	1093			

表 18-51 对蓋二醇保留指数[5]

柱温：130℃

化合物 \ 固定液 I	Apiezon L	PEG-6000 +Hyprose SP 80	化合物 \ 固定液 I	Apiezon L	PEG-6000 +Hyprose SP 80
顺-2-羟基蓋醇	1408	2160	4-羟基新异蓋醇	1395	2139
顺-2-羟基新蓋醇	1423	2179	4-羟基新蓋醇	1377	2124
反-2-羟基蓋醇	1412	2179	反-5-羟基蓋醇	1417	2305
顺-2-羟基新异蓋醇	1433	2208	反-5-羟基异蓋醇	1446	2340
顺-2-羟基异蓋醇	1458	2228	顺-5-羟基新蓋醇	1321	2013
反-2-羟基异蓋醇	1448	2248	顺-5-羟基新异蓋醇	1417	2130
反-2-羟基新异蓋醇	1450	2228	反-5-羟基新异蓋醇	1402	2260
反-2-羟基新蓋醇	1430	2294	1-羟基新香芹蓋醇	1378	2212
4-羟基新香芹蓋醇	1420	2200	1-羟基新异香芹蓋醇	1378	2140
4-羟基异香芹蓋醇	1450	2244	1-羟基蓋醇	1394	2250
4-羟基香芹蓋醇	1420	2244	1-羟基新蓋醇	1394	2200
4-羟基新异香芹蓋醇	1450	2296	反-6-羟基香芹蓋醇	1449	2352
4-羟基蓋醇	1395	2062			

表 18-52 单萜烯与倍半萜烯类化合物的保留指数[57]

固定液①	聚乙二醇类		甲基硅氧烷类	
化合物	I	t_r/℃	I	t_r/℃
别香橙烯 Alloaromadendrene	1660	130	1475	150
顺式别罗勒烯 Allo-ocimene *cis*-	1373	70	1132	110
反式别罗勒烯 Allo-ocimene *trans*-	1392	70	1120	110
α-紫穗槐烯 Amorphene α-	1724	165	1492	170
驱蛔脑 Ascaridole	—	—	1278	110
驱蛔脑环氧衍生物 Ascaridole epoxide	—	—	1215	110
α-埧巴烯 Barbatene α-	1627	150	1440	170
β-埧巴烯 Barbatene β-	1690	150	1473	170
双环吉马烯 Bicyclogermacrene	1738	130	—	—
甜没药烷(a) Bisabolane a	1492	130	1448	150
甜没药烷(b) Bisabolane b	1510	130	1458	150
α-甜没药烯 Bisabolene α-	1766	165	1505	170
β-甜没药烯 Bisabolene β	1745	165	1496	130
α-甜没药醇 Bisabolol α-	2022	160	1595	175
β-甜没药醇 Bisabolol β-	—	—	1666	175
冰片 Borneol	—	—	1154	110
	·	·	1177	175
乙酸冰片酯 Bornyl acetate	1599	135	1278	135
	1615	150	—	—
β-波旁烯 Bourbonene β-	1586	165	1386	130
δ-荜澄茄烯 Cadinene δ-	1784	165	1504	130
γ-荜澄茄烯 Cadinene γ-	1792	165	1507	130
α-甜旗烯 Calacorene α-	1926	165	—	—
去氢白菖烯 Calamenene	1839	150	1524	170
樟烷 Camphane	1021	65	953	100
樟烯 Camphene	1066	75	952	100
樟脑 Camphor	1078	75	956	100
顺蒈烷 Carane *cis*-	—	—	1126	110
3-蒈烯 Carene 3-	1064	65	986	100
	1141	75	1009	100

续表

固　定　液[1]	聚乙二醇类		甲基硅氧烷类	
化　合　物	I	t_c/℃	I	t_c/℃
	1156	75	1013	100
顺香芹醇　Carveol *cis*	—	—	1215	120
反香芹醇　Carveol *trans*-	—	—	1200	120
顺乙酸香芹酯　Carveyl acetate *cis*-	1795	150	—	—
反乙酸香芹酯　Carveyl acetate *trans*-	1759	150	—	—
香芹孟酮　Carvomenthone	—	—	1181	110
乙酸香芹孟酯　Carvomenthyl acetate	1641	150	—	—
香芹酮　Carvone	—	—	1223	125
丁香烷(a)　Caryophyllane *a*	1522	130	1425	150
丁香烷(b)　Caryophyllane *b*	1533	130	1432	150
丁香烷(c)　Caryophyllane *c*	1555	130	1450	150
丁香烷(d)　Caryophyllane *d*	1562	130	1450	150
丁香烯　Caryophyllene	1618	130	1436	150
	1655	165	1417	130
8*βH* 柏木烷　Cedrane 8*βH*-	1617	130	1458	150
8*αH*-柏木烷　Cedrane 8*αH*	1627	130	1465	150
α-柏木烯　Cedrene *α*-	1640	165	1414	130
β-柏木烯　Cedrene *β*-	1670	165	1421	130
雪松醇　Cedrol	—	—	1616	175
菊化酮　Chrysanthenone	—	—	1100	100
1,4-桉树脑　Cineole 1,4-	—	—	1000	80
1,8-桉树脑　Cineole 1,8-	1223	70	1025	100
香茅醛　Citronellal	1491	135	1143	135
	—	—	1146	160
香茅酸　Citronellic acid	—	—	1300	125
β-香茅醇　Citronellol *β*-	1765	150	1216	100
	—	—	1224	175
α-香茅醇　Citronellol *α*-	1760	150	—	—
乙酸香茅酯　Citronellyl acetate	1662	135	1335	135
丁酸香茅酯　Citronellyl butyrate	1671	150	1335	140
甲酸香茅酯　Citronellyl formate	1811	150	—	—
异丁酸香茅酯　Citronellyl isobutyrate	1638	150	—	—
丙酸香茅酯　Citronellyl propionate	1739	150	—	—
别丁香烷　Clovane	1738	150	—	—
别丁香烯　Clovene	1621	175	—	—
	1601	175	—	—
α-玷理烯　Copaene *α*-	1551	165	1378	130
Cubebene *α*-	1481	130	1362	150
β-玷理烯　Cubebene *β*-	1560	130	1400	150
花侧柏烯　Cuparene	1811	130	1506	150
	1838	150	1516	170
(ar-)*α*-姜黄烯　Curcumene *α* (ar-)	1787	165	1475	130
β-姜黄烯　Curcumene *β*	1756	165	1510	170
α-环柠檬醛　Cyclocitral *α*-	—	—	1100	110
β-环柠檬醛　Cyclocitral *β*-	—	—	1200	125
环洒剔烯　Cyclosativene	1549	165	1400	170
对伞花烃　Cymene *p*-	1250	75	1016	100
	1275	70	1018	100
对伞花烃-7-醇　Cymene-7-ol *p*-	—	—	1270	115

续表

固　定　液[1]	聚乙二醇类		甲基硅氧烷类	
化　合　物	I	t_c/℃	I	t_c/℃
对伞花烃-8-醇　Cymene-8-ol *p*	—		1167	115
对异丙苯甲烷　Cymenene	—	—	1277	100
莎草烯　Cyperene	1606	165	1398	130
二羟姜黄烯　Dihydrocurcumene	1696	130	1448	150
二羟牻牛儿醇　Dihydrogeraniol	1759	150	—	-
二羟葎草烯　Dihydrohumulene	1655	175	-	—
1,2-二羟里哪醇　Dihydrolinalool 1,2-	1537	150	—	—
6,7-二羟里哪醇　Dihydrolinalool 6,7	1449	150	—	-
6,10-二羟香叶烯醇　Dihydromyrcenol 6,10	1473	150	1056	80
二羟橙花醇　Dihydronerol	1725	150	—	—
3,7 二甲基-1,6-辛二烯　Dimethyl-1,6-octadiene 3,7	—	—	946	90
2,6-二甲基辛烷　Dimethyloctane 2,6-	922	65	938	100
2,6 二甲基-2-辛烯　Dimethyl-2-octene 2,6-	—	—	966	80
榄香烷　Elemane	1460	130	1403	150
β-榄香烯　Elemene *β*-	1608	130	1400	150
4*αH*,5*αH*-桉叶油烷　Eudesmane 4αH,5αH-	1636	130	1497	150
4*βH*,5*αH*-桉叶油烷　Eudesmane 4βH,5αH-	1582	130	1405	150
反,反 *α* 金合欢烯　Farnesene trans,*trans-α-*	1756	130	1501	150
反 *β* 金合欢烯　Farnesene *trans-β-*	1671	130	1426	150
反,反-金合欢醇　Farnesol *trans,trans-*	1668	165	1449	170
乙酸金合欢酯　Farnesyl acetate	—	—	1745	175
α-小茴香烯　Fenchene *α*-	2225	200	1787	200
β-小茴香烯　Fenchene *β*-	1071	70	957	110
小茴香醇　Fenchol	1057	70	949	110
小茴香酮　Fenchone	1580	135	1125	135
牻牛儿醛　Geranial	—	—	1077	105
牻牛儿酸　Geranic acid	—	—	1260	120
牻牛儿醇　Geraniol	—	—	1347	140
乙酸牻牛儿酯　Geranyl acetate	1842	150	1234	175
丁酸牻牛儿酯　Geranyl butyrate	—	—	1237	120
甲酸牻牛儿酯　Geranyl formate	1754	135	1363	135
异丁酸牻牛儿酯　Geranyl isobutyrate	1904	150	—	-
丙酸牻牛儿酯　Geranyl propionate	1717	150	—	—
牻牛儿烷(b)　Germacrane *b*	1821	150	—	—
牻牛儿烷(c)　Germacrane *c*	1834	150	—	—
牻牛儿烷(d)　Germacrane *d*	1572	130	1477	150
D-牻牛儿烯　Germacrene D	1585	130	1482	150
α-古芸烯　Gurjunene *α*-	1593	130	1489	150
β-古芸烯　Gurjunene *β*-(calarene)	1718	130	1488	150
	1591	165	1413	130
	1656	165	1435	130
γ-雪松烯　Himachalene *γ*-	1723	150	1499	170
葎草烷　Humulane	1609	175	—	—
葎草烯　Humulene	1719	165	1447	130
虹蚁素　Iridomyrmecin	—	—	1400	135
异冰片　Isoborneol	—	—	1149	110
乙酸异冰片酯　Isobornyl acetate	1623	150	—	—
反异莰烷　Isocamphane *trans-*	1056	65	975	100

续表

固定液①	聚乙二醇类		甲基硅氧烷类	
化合物	I	t_c/℃	I	t_c/℃
顺异莰烷 Isocamphane *cis*-	1065	65	980	100
顺异牻牛儿醇 Isogeraniol *cis*-	1812	150	—	—
反异牻牛儿醇 Isogeraniol *trans*-	1812	150	—	—
γ-异牻牛儿醇 Isogeraniol γ-	1800	150	—	—
乙酸异牻牛儿酯 Isogeranyl acetate γ	1726	150	—	—
异蚁素 Isoiridomyrmecin	—	—	1422	150
异薄荷醇 Isomenthol	1667	130	1182	130
异薄荷酮 Isomenthone	—	—	1174	100
乙酸异薄荷酯 Isomenthyl acetate	1528	130	1156	130
异松莰醇 Isopinocampheol	1579	130	1283	130
	1599	150	—	—
异松莰酮 Isopinocamphone	—	—	1170	115
异蒲勒醇 Isopulegol	—	—	1157	110
乙酸异蒲勒酯 Isopulegyl acetate	—	—	1133	110
异洒剔烯 Isosativene	1608	150	—	—
熏衣草花醇 Lavandulol	1639	165	1441	170
乙酸熏衣草花酯 Lavandulyl acetate	1707	150	1153	110
苧烯 Limonene	1609	150	—	—
	1187	75	1025	100
	1210	70	1024	100
顺苧烯环氧化合物 Limonene epoxide *cis*-	—	—	1119	100
反苧烯环氧化合物 Limonene epoxide *trans*-	—	—	1122	100
里哪醇 Linalool	1533	135	1097	135
	1555	150	1086	90
里哪醇氧化物 Ⅰ(吡喃) Linalool oxide Ⅰ(pyran)	—	—	1063	100
里哪醇氧化物 Ⅱ(吡喃) Linalool oxide Ⅱ(pyran)	—	—	1077	100
乙酸里哪酯 Linalyl acetate	1569	150	1240	130
丁酸里哪酯 Linalyl butyrate	1698	150	—	—
异丁酸里哪酯 Linalyl isobutyrate	1622	150	—	—
丙酸里哪酯 Linalyl propionate	1624	150	—	—
长叶环烯 Longicyclene	1554	165	1371	130
7αH-长叶烷 Longifolane 7αH	1627	130	1460	150
7-βH-长叶烷 Longifolane 7βH-	1633	130	1467	150
长叶烯 Longifolene	1643	165	1404	130
α-长叶松节烯 Longipinene α-	1541	165	1359	130
β-长叶松节烯 Longipinene β-	1612	150	1432	170
顺对薄荷-2,8-二烯-1-醇 Mentha-2,8-dien-1-ol *cis*-*p*-	—	—	1120	95
反对薄荷烷 Menthane *trans*-*p*-	1022	65	981	100
顺对薄荷烷 Menthane *cis*-*p*-	1045	65	995	100
对薄荷-1-醇 Menthan-1-ol *p*-	—	—	1156	160
对薄荷-2-醇 Menthan-2-ol *p*-	—	—	1205	160
顺对薄荷-7-醇 Menthan-7-ol *cis*-*p*-	1823	120	—	—
反对薄荷-7-醇 Menthan-7-ol *trans*-*p*-	1800	120	—	—
对薄荷-8-醇 Menthan-8-ol *p*-	—	—	1162	160
顺对薄荷-9-醇 Menthan-9-ol *cis*-*p*-	1806	120	—	—
反对薄荷-9-醇 Menthan-9-ol *trans*-*p*-	1777	120	—	—
顺对乙酸薄荷-8-基酯 Menthan-8-yl acetate *cis*-*p*	1598	150	—	—
反对乙酸薄荷-8-基酯 Menthan-8-yl acetate *trans*-*p*-	1623	150	—	—

续表

固　定　液[①]	聚乙二醇类		甲基硅氧烷类	
化　合　物	I	t_c/℃	I	t_c/℃
对薄荷-1-烯　Menth-1-ene *p*-	—	—	985	160
对薄荷-4(8)-烯　Menth-4(8)-ene *p*-	—	—	998	160
对薄荷-1-烯-9-醇　Menth-1-en-9-ol *p*-	1904	120	—	—
对薄荷-1(7)-烯-9-醇　Menth-1(7)-en-9-ol *p*-	1881	120	—	—
顺对薄荷-2-烯-7-醇　Menth-2-en-7-ol *cis-p*-	1839	120	—	—
反对薄荷-2-烯-7-醇　Menth-2-en-7-ol *trans-p*-	1842	120	—	—
对薄荷-3-烯-9-醇　Menth-3-en-9-ol *p*-	1736	120	—	—
对薄荷-8-烯-1-醇　Menth-8-en-1-ol *p*-	—	—	1156	160
对薄荷-8-烯-2-醇　Menth-8-en-2-ol *p*-	—	—	1208	160
薄荷呋喃　Menthofuran	1503	130	1147	130
薄荷醇　Menthol	1640	130	1168	130
薄荷酮　Menthone	1518	130	1158	130
乙酸薄荷酯　Menthyl acetate	1600	150	—	—
α-衣兰油烯　Muurolene α-	1753	165	1495	130
γ-衣兰油烯　Muurolene γ-	1695	130	1486	150
	1725	165	1486	150
ε-衣兰油烯　Muurolene ε-	1714	165	1445	130
香叶烯　Myrcene	1166	75	988	100
	1168	70	984	100
香叶烯-8-醇　Myrcene-8-ol	1919	150	—	—
香叶烯醇　Myrcenol	1631	150	—	—
乙酸香叶烯酯　Myrcenyl acetate	1595	150	—	—
顺桃金娘烷醇　Myrtanol *cis*-	—	—	1245	120
桃金娘烯醛　Myrtenal	—	—	1173	120
桃金娘烯醇　Myrtenol	—	—	1281	120
乙酸桃金娘烯酯　Myrtenyl acetate	1720	150	—	—
乙酸新香芹蓋酯　Neocarvomenthyl acetate	1604	150	—	—
乙酸新异香芹蓋酯　Neoisocarvomenthyl acetate	1672	150	—	—
新异薄荷醇　Neoisomenthol	1634	130	1180	130
乙酸新异薄荷酯　Neoisomenthyl acetate	1602	130	1297	130
	1623	150	—	—
新薄荷醇　Neomenthol	—	—	1159	120
乙酸新薄荷酯　Neomenthyl acetate	1569	150	—	—
橙花醛　Neral	—	—	1220	120
橙花醇　Nerol	1808	150	1218	120
橙花酸　Nerolic acid	—	—	1316	140
顺橙花叔醇　Nerolidol *cis*-	—	—	1540	175
乙酸橙花基酯　Neryl acetate	1735	150	1343	135
丁酸橙花基酯　Neryl butyrate	1868	150	—	—
甲酸橙花基酯　Neryl formate	1700	150	—	—
异丁酸橙花基酯　Neryl isobutyrate	1790	150	—	—
丙酸橙花基酯　Neryl propionate	1794	150	—	—
顺-β-罗勒烯　Ocimene *cis*-β	1238	70	1027	100
	—	—	1027	90
反-β-罗勒烯　Ocimene *trans*-β-	1257	70	1042	100
顺罗勒醇　Ocimenol *cis*-	1660	150	—	—
反罗勒醇　Ocimenol *trans*-	1685	150	—	—
紫苏子醛　Perilla aldehyde	—	—	1253	120

续表

固定液[①]	聚乙二醇类		甲基硅氧烷类	
化合物	I	t_c/℃	I	t_c/℃
乙酸紫苏子酯 Perillyl acetate	1791	150	–	—
紫苏子醇 Perillyl alcohol	–	—	1281	115
α-水芹烯 Phellandrene α-	1173	70	1007	110
	–	—	1000	90
β-水芹烯 Phellandrene β-	1213	70	1032	110
水芹醇 Phellandrol	1896	120	–	·
顺松节烷 Pinane cis-	1061	65	977	80
	–	—	1002	160
反松节烷 Pinane trans-	1049	65	973	100
α-蒎烯 Pinene α-	1036	75	942	100
	1038	70	939	100
α-蒎烯氧化物 Pinene oxide α-	–	-	1100	112
β-蒎烯 Pinene β-	1120	70	978	100
	1120	75	983	100
松莰酮 Pinocamphone	–	—	1152	110
反松香芹醇 Pinocarveol trans-	—	—	1132	110
反乙酸松香芹酯 Pinocarveyl acetate trans-	1682	150	—	—
顺蒎酮酸 Pinonic acid cis-	—	–	1427	165
胡椒烯酮 Piperitenone	–	-	1315	125
胡椒酮 Piperitone	—	—	1231	125
α-焦岩兰烯 Pyrovetivene α-	1817	165	1522	170
顺玫瑰醚 Rose oxide cis-	–	—	1100	95
反玫瑰醚 Rose oxide trans-	–	—	1114	95
桧烯 Sabinene	1130	70	972	100
顺桧醇 Sabinol(cis-)	—	—	1130	115
顺乙酸桧酯 Sabinyl acetate(cis-)	1677	150	—	—
藏花醛 Safranal	—	—	1167	120
α-檀香醇 Santalol α-	–	—	1660	175
洒剔烯 Sativene	1595	165	1421	170
芹子-4(14),7(11)-二烯 Selina-4(14),7(11)-diene	1816	165	—	—
芹子-4(14),7-二烯 Selina-4(14),7-diene	1694	165	1476	170
芹子-4,11-二烯 Selina-4,11-diene	1702	150	—	—
α-芹子烯 Selinene α-	1751	150	1513	170
β-芹子烯 Selinene β-	1767	165	1506	170
δ-芹子烯 Selinene δ-	1728	165	—	—
表-α-10-芹子烯 Selinene 10-epi-α-	1803	165	–	—
顺万寿菊酮 Tagetone cis-	—	-	1136	110
反万寿菊酮 Tagetone trans-	–	-	1125	110
α-萜品烯 Terpinene α-	1189	70	1016	100
	1188	70	1018	110
γ-萜品烯 Terpinene γ-	1247	75	1056	100
萜品烯-4-醇 Terpinene-4-ol	1601	135	1129	135
	–	—	1170	115
	—	—	1160	175
乙酸萜品烯酯 Terpinene-4-yl acetate	1640	150	1282	120
α-萜品醇 Terpineol α-	1685	135	1178	135
	–	—	1205	160
萜品油烯 Terpinolene	1279	75	1074	100

续表

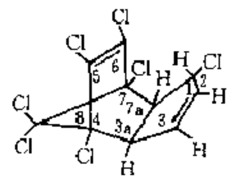
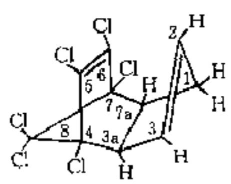
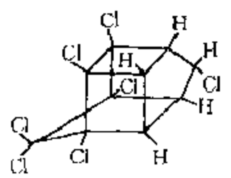
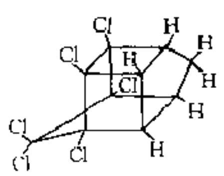
固　定　液①	聚乙二醇类		甲基硅氧烷类	
化　合　物	I	t_c/℃	I	t_c/℃
	1289	70	1081	100
乙酸萜品酯　Terpinyl acetate	1722	150	1337	140
顺-β-乙酸萜品酯　Terpinyl acetate *cis-β-*	1622	150	—	—
四羟栊牛儿醇　Tetrahydrogeraniol	1675	150	—	—
乙酸四羟栊牛儿醇　Tetrahydrogeranyl acetate	1582	150	—	—
四羟葎草烯　Tetrahydrohumulene	1653	175	—	—
四羟熏衣草花醇　Tetrahydrolavandulol	1600	150	—	—
四羟里哪醇　Tetrahydrolinalool	1431	150	1088	90
乙酸四羟里哪酯　Tetrahydrolinalyl acetate	1422	150	—	—
四羟香叶烯醇　Tetrahydromyrcenol	1449	150	-	-
四羟罗汉柏烷(a)　Tetrahydrothujopsane a	1668	130	1496	150
四羟罗汉柏烷(b)　Tetrahydrothujopsane b	1678	130	1508	150
顺苧烯-4-醇　Thuj-2-en-4-ol *cis*	1551	100	1053	140
反苧烯-4-醇　Thuj-2-en-4-ol *trans-*	1468	100	1035	140
α-苧烯　Thujene α-	1038	70	931	100
	1023	70	935	110
α-苧酮　Thujone α-	—	—	1100	110
罗汉柏烯　Thujopsene	1684	165	1430	130
乙酸苧基酯　Thujyl acetate	1626	150	—	—
百里酚　Thymol	—	—	1270	130
三环萜　Tricyclene	1009	75	928	100
顺马鞭烷醇　Verbenol *cis-*	—	—	1165	100
反马鞭烷醇　Verbenol *trans-*	—	—	1140	120
马鞭烷酮　Verbenone	—	—	1185	110
α-衣兰烯　Ylangene α	1539	165	1396	170
姜烯　Zingiberene	1738	165	1480	170

① 固定液"聚乙二醇类"指 DB-Wax，BP20，PEG 20M 与 HP20；"甲基硅氧烷类"指 SE-30，SF-96，OV-1，OV-101，BP1，CP SiL 5CB，SP2100，DB1 与 HP1。

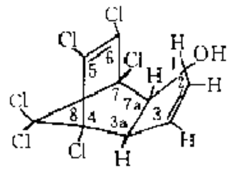
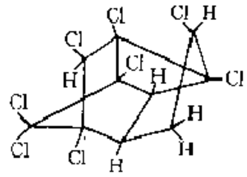
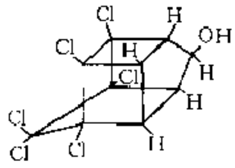
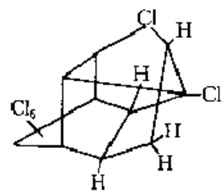
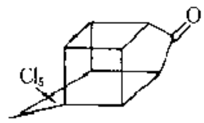
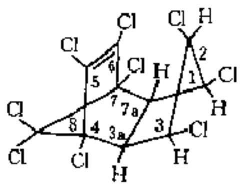
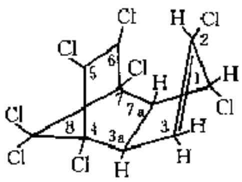
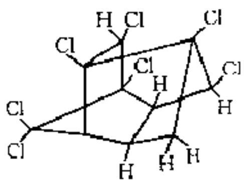
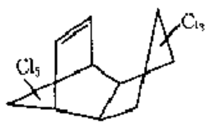
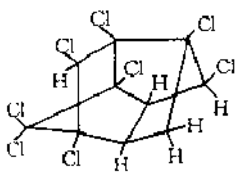
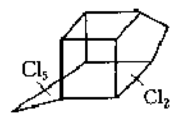
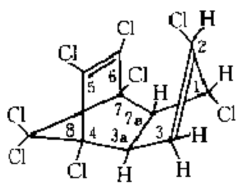
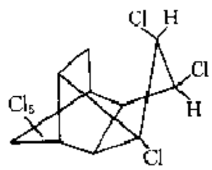
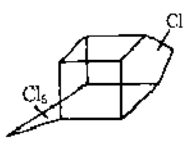
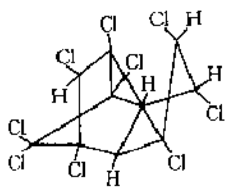
第五节　农药的保留指数

表 18-53　农药及其光化产品的保留指数[19]

固定液：OV-17；柱温：210℃

化合物名称	结　构　式	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	化合物名称	结　构　式	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
七氯		2125.8	3.2	氯丹		2067.8	29.9
光七氯		2308.6	17.7	光氯丹		2305.8	15.2

续表

化合物名称	结构式	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	化合物名称	结构式	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
1 羟基氯丹		2283.2	13.3	光反氯丹		2731.5	18.5
光-1-羟基氯丹		2604.0	38.8	光反氯丹		2731.5	18.5
1-羰基氯丹光化产品		2192.7	63.9	反九氯		2397.1	25.4
顺氯丹		2408.5	19.9	反九氯光化产品		2159.5	24.2
光顺氯丹		2600.9	14.1	反九氯光化产品		2285.2	18.0
光顺氯丹		2600.9	14.1	反九氯光化产品		2329.0	21.0
反氯丹		2380.0	24.9	反九氯光化产品		2459.1	16.0
反氯丹光化产品		2247.2	38.5	光反九氯		2576.6	21.5

续表

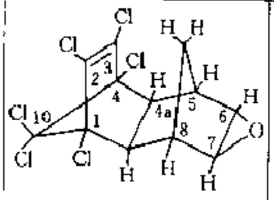
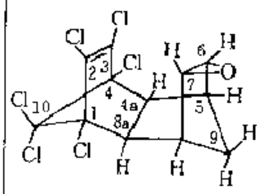
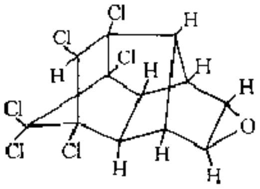
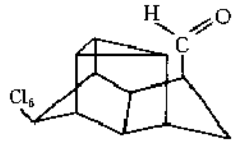
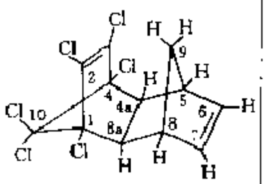
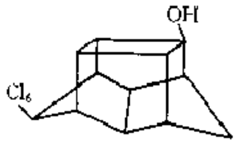
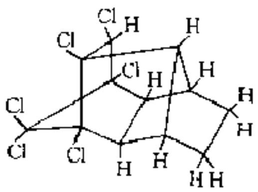
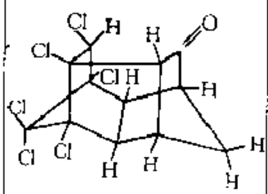
化合物名称	结构式	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	化合物名称	结构式	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
狄氏剂		2466.2	16.0	异狄氏剂		2527.9	24.6
光狄氏剂		2908.0	9.5	异狄氏剂(醛)		2668.3	14.5
艾氏剂		2206.2	5.6	异狄氏剂(醇)		2704.6	17.4
艾氏剂光化产品		2732.8	63.4	异狄氏剂(酮)		2822.5	23.5

表 18-54 农药类化合物的保留指数[67]

固定液：SE-54

柱温/°C	240	260	$\frac{\partial I}{\partial T}$	柱温/°C	240	260	$\frac{\partial I}{\partial T}$
化合物 \ 保留指数	I			化合物 \ 保留指数	I		
甲基对硫磷	1940.3	1958.8	0.923	艾氏剂	2075.1	2109.9	1.742
胺甲萘	1951.9	1972.7	1.041	p,p'-DDE	2236.7	2262.8	1.303
氧乐果	1640.1	1651.3	0.556	狄氏剂	2264.8	2300.0	1.759
α-六六六	1754.5	1779.6	1.251	p,p'-DDT	2323.6	2349.1	1.275
乐果	1779.1	1972.5	0.669	m,p'-DDT	2332.3	2362.5	1.513
β 六六六	1799.6	1820.9	1.063	p,p'-DDT	2398.3	2428.0	1.486
γ-六六六	1816.9	1843.7	1.341	甲氰菊酯	2513.9	2531.9	0.900
δ-六六六	1853.8	1881.1	1.363	苯硫磷	2506.9	2534.7	1.388
马拉硫磷	2005.4	2018.4	0.649	三氯杀螨砜	2560.2	2590.5	1.516

第六节　糖类物质的保留指数

表 18-55　单糖（TMS 衍生物）保留指数[33]

固定液	OV-101	SE-30	固定液	OV-101	SE-30
I 柱温/℃ 化合物	175	165	I 柱温/℃ 化合物	175	165
2-脱氧核糖 O-甲基肟	1570	1570	果糖 O-2-甲基肟	1935	1950
阿拉伯糖 O-甲基肟	1680	1690	半乳糖 O-1-甲基肟	1945	1955
鼠李糖 O-1-甲基肟	1750	1755	半乳糖 O-2-甲基肟	1965	1975
鼠李糖 O-2-甲基肟	1760	1760	葡糖 O-1-甲基肟	1950	1960
2-脱氧葡糖 O-甲基肟	1825	1830	葡糖 O-2-甲基肟	1970	1980
果糖 O-1-甲基肟	1925	1935			

表 18-56　二糖（OTMS 醚）保留指数[63]

固定液	SE-54	OV-17	固定液	SE-54	OV-17
I 柱温/℃ 化合物	280	240	I 柱温/℃ 化合物	280	240
α,α-海藻糖	2820	2697	β-吡喃半乳糖基甘露糖	2723	2577
蔗糖	2750	2596	α-异乳糖	2671	2544
α-昆布二糖	2844	2757	β-异乳糖	2650	2519
β-昆布二糖	2876	2783	α-蜜二糖	2924	2848
α-黑曲霉糖	2780	2678	β-蜜二糖	2947	2869
β-黑曲霉糖	2806	2714	α-吡喃葡萄糖基呋喃果糖	2828	2682
松二糖	2783	2670	β-吡喃葡萄糖基呋喃果糖	2828	2726
α-纤维二糖	2754	2666	α-异麦芽糖	2946	2879
β-纤维二糖	2861	2771	β-异麦芽糖	2994	2929
α-麦芽糖	2744	2652	α-半乳二糖	2831	2741
β-麦芽糖	2785	2658	β-半乳二糖	2901	2814
α-乳糖	2707	2626	α-龙胆二糖	2971	2912
β-乳糖	2833	2738	β-龙胆二糖	2978	2921
α-吡喃半乳糖基甘露糖	2627	2498			

表 18-57　戊醛糖（TMS 衍生物）保留指数（一）[54]

固定液	SE-54	OV-17	OV-215	OV-225	Carbowax 20M	固定液	SE-54	OV-17	OV-215	OV-225	Carbowax 20M
I 柱温/℃ 化合物	180	160		150	160	I 柱温/℃ 化合物	180	160		150	160
α-呋喃核糖	1626	1624	1675	1660	1528	呋喃木糖	1610	1628	1670	1650	1530
β-呋喃核糖	1636	1647	1688	1676	1550	呋喃木糖	1622	1629	1680	1650	1538
α-吡喃核糖	1663	1651	1775	1710	1550	α-吡喃木糖	1762	1729	1804	1744	1630
β-吡喃核糖	1642	1626	1709	1683	1531	β-吡喃木糖	1777	1772	1844	1807	1736
α-呋喃阿糖	1596	1597	1609	1600	1531	α-呋喃来苏糖	1633	1627	1676	1676	1543
β-呋喃阿糖	1666	1682	1738	1711	1603	α-吡喃来苏糖	1593	1599	1667	1630	1486
α-吡喃阿糖	1601	1597	1690	1633	1524	β-吡喃来苏糖	1660	1646	1724	1703	1553
β-吡喃阿糖	1635	1643	1717	1703	1586						

表 18-58 戊醛糖（TMS 衍生物）保留指数（一）[53]

固定液：SE-54　　柱温：180℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
α-右型-吡喃核糖	1663	α-右型-呋喃阿糖	1596	β-右型-呋喃木糖	1622
β-右型-吡喃核糖	1692	β-右型-呋喃阿糖	1666	α-右型-吡喃来苏糖	1593
α-右型-呋喃核糖	1626	α-右型-吡喃木糖	1762	β-右型-吡喃来苏糖	1660
β-右型-呋喃核糖	1637	β-右型-吡喃木糖	1777	α-右型-呋喃来苏糖	1633
α-右型-吡喃阿糖	1601	α-右型-呋喃木糖	1610	β-右型-呋喃来苏糖	1615
β-右型-吡喃阿糖	1635				

表 18-59 己醛糖（TMS 衍生物）保留指数（一）[53]

固定液	SE-54	OV-17	OV-215	OV-225	Carbowax 20M	固定液	SE-54	OV-17	OV-215	OV-225	Carbowax 20M
柱温/℃ I 化合物	180		170		160	柱温/℃ I 化合物	180		170		160
α-呋喃阿洛糖	1857	1829	1849	1772	1768	α-呋喃古罗糖	1908	1867	1824	1830	1832
β-呋喃阿洛糖	1896	1886	849	1831	1843	β-呋喃古罗糖	1982	1883	1938	1858	—
α-吡喃阿洛糖	1862	1814	1849	1789	1754	α-吡喃古罗糖	1858	1803	1826	1762	1757
β-吡喃阿洛糖	1879	1829	1849	1789	1778	β-吡喃古罗糖	1825	1789	1765	1734	1729
α-呋喃阿卓糖	1837	1972	1774	1699	1739	α-呋喃艾杜糖	1896	1832	1853	1796	1815
β-呋喃阿卓糖	1912	1871	1739	1699	1838	β-呋喃艾杜糖	1858	1816	1793	1766	1771
α-吡喃阿卓糖	1830	1765	1872	1826	1703	α-吡喃艾杜糖	1858	1812	1837	1784	1764
β-吡喃阿卓糖	1830	1758	1777	1710	1695	β-吡喃艾杜糖	1909	1865	1893	1846	1841
α-呋喃葡糖	—	-	1824	1783	—	α-呋喃半乳糖	1941	1909	1922	1878	1869
β-呋喃葡糖	—	-	1824	1800	—	β-呋喃半乳糖	1852	1827	1779	1759	1763
α-吡喃葡糖	1924	1908	1905	1853	1793	α-吡喃半乳糖	1894	1859	1874	1817	1786
β-吡喃葡糖	2022	2002	2175	1984	1972	β-吡喃半乳糖	1941	1902	1946	1904	1869
α-呋喃甘露糖	1944	—	1915	1870	—	α-呋喃塔罗糖	1882	1867	1918	1816	1823
β-呋喃甘露糖	—	—	2032	—	-	β-呋喃塔罗糖	1863	1836	1833	1800	1794
α-吡喃甘露糖	1835	1798	1794	1729	1716	α-吡喃塔罗糖	1882	1848	1840	1813	1890
β-吡喃甘露糖	1937	1886	1963	1882	1862	β-吡喃塔罗糖	1943	1900	2021	1960	1896

表 18-60 己醛糖（TMS 衍生物）保留指数（二）[55]

固定液：OV-225　　柱温：170℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
α-右型-吡喃阿洛糖	1754	β-右型-呋喃阿卓糖	1838	α-右型-呋喃艾杜糖	1815
β-右型-吡喃阿洛糖	1778	α-右型-吡喃古罗糖	1760	β-右型-呋喃艾杜糖	1771
α-右型-呋喃阿洛糖	1768	β-右型-吡喃古罗糖	1743	α-右型-吡喃塔罗糖	1813
β-右型-呋喃阿洛糖	1843	α-右型-呋喃古罗糖	1828	β-右型-吡喃塔罗糖	1896
α-右型-吡喃阿卓糖	1703	β-右型-呋喃古罗糖	1845	α-右型-呋喃塔罗糖	1823
β-右型-吡喃阿卓糖	1695	α-右型-吡喃艾杜糖	1764	β-右型-呋喃塔罗糖	1794
α-右型-呋喃阿卓糖	1739	β-右型-吡喃艾杜糖	1841		

表 18-61 醛糖（TMS 衍生物）保留指数[55]

固定液：OV-225　　柱温：170℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
α-右型-吡喃葡糖	1853	α-右型-吡喃半乳糖	1817	α-右型-吡喃甘露糖	1729
β-右型-吡喃葡糖	1984	β-右型-吡喃半乳糖	1904	β-右型-吡喃甘露糖	1882
α-右型-呋喃葡糖	1783	α-右型-呋喃半乳糖	1878	α-右型-呋喃甘露糖	1870
β-右型-呋喃葡糖	1800	β-右型-呋喃半乳糖	1759	β-右型-呋喃甘露糖	1948

表 18-62 糖醛酸保留指数[26]

固定液 / 化合物	OV-1	OV-17	QF-1	固定液 / 化合物	OV-1	OV-17	QF-1
柱温/°C	160		120	柱温/°C	160		120
甘油酸	1340	1341	1500	2-顺甲基核糖酸	1880	1791	1976
2-顺甲基甘油酸	1348	1314	1460	2-顺甲基阿糖酸	1876	1786	1966
2-脱氧特窗酸	1448	1446	1616	2-脱氧阿糖己糖酸	1915	1853	2044
3-脱氧特窗酸	1431	1430	1589	2-脱氧来苏己糖酸	1920	1858	2050
4-脱氧赤酮酸	1364	1346	1512	3-脱氧核糖己糖酸	1920	1861	2044
4-脱氧苏氨酸	1376	1358	1514	3-脱氧阿糖己糖酸	1921	1867	2043
赤酮酸	1581	1536	1699	3-脱氧木质己糖酸	1915	1872	2048
苏氨酸	1589	1568	1723	3-脱氧来苏己糖酸	1910	1849	2036
3,4-二脱氧戊糖酸	1517	1529	1693	6-脱氧甘露糖酸	1865	1771	1959
3,5-二脱氧赤戊糖酸	1422	1411	1570	6-脱氧半乳糖酸	1899	1826	1993
3,5-二脱氧苏戊糖酸	1437	1436	1597	3-顺甲基古罗糖酸	1938	1882	2040
3-脱氧-2-顺(羟甲基)特窗酸	1671	1626	1789	2-顺(羟甲基)戊糖酸(木质、来苏异构物)	2035	1920	2107
2-顺甲基赤酮酸	1626	1563	1730	阿洛糖酸	2035	1927	2119
2-脱氧赤戊醣酸	1698	1659	836	阿卓糖酸	2061	1968	2143
2-脱氧苏戊醣酸	1697	1655	1834	葡糖酸	2068	1973	2153
3-脱氧赤戊醣酸	1683	1660	1824	甘露糖酸	2034	1923	2115
3-脱氧苏戊醣酸	1698	1681	1848	古罗糖酸	2029	1924	2103
核糖酸	1823	1749	1915	艾杜酸	2082	1996	2176
阿糖酸	1835	1777	1940	半乳糖酸	2062	1972	2143
木质酸	1818	1767	1917	塔龙酸	2059	1964	2155
来苏糖醇酸	1832	1760	1936	2,5-脱水-3,4-二脱氧戊糖酸	1456	1625	1872
2,4-二脱氧-3-顺甲基戊糖酸	1575	1575	1749	1,4-脱水-3-脱氧戊五醇-2-羧酸(赤、苏异构体)	1652	1690	1866
2,6-二脱氧核糖己糖酸	1726	1672	1852	2,5-脱水葡糖酸	1898	1926	2189
3,4-二脱氧己糖酸(赤、苏异构体)	1802	1787	1969	2,5-脱水甘露糖酸	1842	1870	2120
3,6-二脱氧核糖己糖酸	1710	1669	1840	2,5-脱水塔龙酸	1890	1921	2171
3,6-二脱氧阿糖己糖酸	1717	1684	1861				
3-脱氧-2-顺羟甲基赤戊糖酸	1931	1860	2043				
3-脱氧-2-顺羟甲基苏戊糖酸	1919	1849	2027				

表 18-63 糖醛酸内酯保留指数[26]

柱温：160°C

固定液 / 化合物	OV-1	OV-17	QF-1	固定液 / 化合物	OV-1	OV-17	QF-1
2-脱氧特窗酸-1,4-内酯	1216	1394	1867	核糖酸-1,4-内酯	1697	1775	2230
3-脱氧特窗酸-1,4-内酯	1165	1360	1695	阿糖酸-1,4-内酯	1647	1716	2059
赤酮酸-1,4-内酯	1431	1585	2001	木质酸-1,4-内酯	1665	1737	2154
苏氨酸-1,4-内酯	1383	1484	1862	来苏酸-1,4-内酯	1752	1832	2282
3,5-二脱氧赤戊糖酸-1,4-内酯	1165	1330	1704	2,6-二脱氧核糖己糖酸-1,4-内酯	1538	1654	2149
3,5-二脱氧苏戊糖酸-1,4-内酯	1183	1369	1738	3,6-二脱氧阿糖己糖酸-1,4-内酯	1519	1648	2004
3-脱氧-2-顺(羟甲基)特窗酸-1,4-内酯	1390	1498	1825	3-脱氧-2-顺羟甲基赤戊糖酸-1,4-内酯	1702	1760	2097
2-顺-甲基赤酮酸-1,4-内酯	1425	1519	1917	3-脱氧-2-顺羟甲基苏戊糖酸-1,4-内酯	1715	1775	2130
2-脱氧赤戊糖酸-1,4-内酯	1509	1629	2136	2-顺甲基核糖酸-1,4-内酯	1657	1697	2085
2-脱氧苏戊糖酸-1,4-内酯	1536	1692	2193	2-顺甲基阿糖酸-1,4-内酯	1654	1682	2027
3-脱氧赤戊糖酸-1,4-内酯	1488	1635	2019	2-脱氧阿糖己糖酸-1,4-内酯	1813	1928	2394
3-脱氧苏戊糖酸-1,4-内酯	1505	1660	2030	2-脱氧来苏己糖酸-1,4-内酯	1797	1873	2433

续表

I 固定液 / 化合物	OV-1	OV-17	QF-1	I 固定液 / 化合物	OV-1	OV-17	QF-1
3-脱氧核糖己糖酸-1,4-内酯	1791	1855	2274	古罗糖酸-1,4-内酯	1953	1993	2389
3-脱氧阿糖己糖酸-1,4-内酯	1785	1876	2254	艾杜酸-1,4 内酯	1956	1982	2443
3 脱氧木质己糖酸-1,4-内酯	1802	1900	2304	半乳糖酸-1,4-内酯	1925	1943	2320
3-脱氧来苏己糖酸-1,4-内酯	1808	1892	2337	塔龙酸-1,4-内酯	1959	1991	2478
6-脱氧甘露糖酸 1,4 内酯	1791	1860	2294	木质酸-1,5-内酯	1705	1785	2189
6-脱氧半乳糖酸 1,4-内酯	1696	1745	2101	葡糖酸-1,5-内酯	1919	1962	2337
阿洛糖酸 1,4-内酯	1962	1991	2474	甘露糖酸-1,5-内酯	1912	1940	2363
阿卓糖酸-1,4-内酯	1901	1912	2259	赤己-2-烯糖酸-1,4-内酯	1988	2029	2439
葡糖酸-1,4-内酯	1932	1960	2356	苏己-2-烯糖酸-1,4-内酯	1980	2028	2469
甘露糖酸 1,4-内酯	2012	2049	2464				

表 18-64 醛合酸保留指数[26]

固定液	OV-1	OV-17	QF-1	固定液	OV-1	OV 17	QF-1
I 柱温/℃ / 化合物	160		120	I 柱温/℃ / 化合物	160		120
丙醇二酸	1386	1455	1675	3-脱氧苏戊糖二酸	1733	1758	1985
顺甲基丙醇二酸	1364	1362	1551	2,4-二脱氧 3 顺甲基戊糖二酸	1612	1645	1870
脱氧苹果酸	1494	1530	1762	2,3,4 三脱氧己糖二酸	1682	1737	1999
顺(羟基甲基)丙醇二酸	1583	1576	1754	顺(3-羟基丙基)丙醇二酸	1771	1780	1961
顺乙基丙醇二酸	1437	1440	1602	3,4-二脱氧己糖二酸	1839	1869	2118
2-脱氧 3 顺甲基苹果酸	1488	1499	1700	顺(2,3-二羟基丙基)丙醇二酸	1949	1928	2113
2,3-二脱氧戊糖二酸	1583	1631	1883	3-脱氧-2-顺羟基甲基赤戊糖二酸	1963	1941	2191
2,4 二脱氧戊糖二酸	1583	1629	1873	3 脱氧 2 顺羟基甲基苏戊糖二酸	1940	1910	2134
顺(2-羟基乙基)丙醇二酸	1696	1694	1884	2-脱氧来苏己糖二酸	1972	1958	2168
2-脱氧-3-顺(羟基甲基)苹果酸	1714	1705	1922	3-脱氧木质己糖二酸	1948	1934	2159
2 脱氧赤戊糖二酸	1720	1728	1948	3-脱氧来苏己糖二酸	1956	1959	2163
2-脱氧苏戊糖二酸	1730	1750	1974	顺(赤-1,2,3-三羟基丙基)丙醇二酸	2072	2004	2169
3-脱氧赤戊糖二酸	1721	1736	1954	顺(苏-1,2,3 三羟基丙基)丙醇二酸	2084	2016	2177

第七节 其他化合物及混合物的保留指数

表 18-65 碳甲硼烷保留指数[33]

固定液	Apiezon L			SF-96			QF-1			XE-60			Carbowax 20M		
柱温/℃	160	200	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	160	200	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	160	180	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	160	200	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	160	200	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
保留指数 / 化合物	I			I			I			I			I		
1,2-$C_2B_{10}H_{12}$	1312	1336	6.0	1283	1310	6.75	1684	1714	14.7	2010	2086	19.0	2175	2216	10.2
1,7 $C_2B_{10}H_{12}$	1150	1172	5.5	1124	1147	5.6	1370	1401	14.6	1512	1584	18.0	1616	1640	6.0
1,12-$C_2B_{10}H_{12}$	1098	1112	3.5	1070	1083	3.2	1229	1245	7.9	1324	1393	17.2	1118	1438	6.0
2,3-$C_2B_4H_8$	1569	1595	6.5	1516	1542	6.6	1742	1779	18.7	1891	1930	9.7	2078	2140	15.5
1,2-$C_2B_8H_{10}$	1132	1148	4.0	1120	1138	4.5	1482	1509	13.2	1754	1824	17.5	1925	1935	2.5
5,6-$C_2B_8H_{12}$	1161	1188	6.75	1114	1135	5.3	1386	1409	11.8	1727	1798	17.75	2174	2213	9.8

表 18-66　烷基硼酸酯保留指数[52]

固定液	SE-30	OV-1	OV-17			OV-225	XE-60
I 柱温/℃ 化合物	110	70	50	70	110	70	110
正丁基硼酸乙基酯	914	—	1044	—	1039	1131	1131
正戊基硼酸乙基酯	1020	1023	1146	1136	1143	1234	1227
正己基硼酸乙基酯	1117	1123	1247	1232	1242	1332	1324
正庚基硼酸乙基酯	1214	1218	—	1330	1341	1429	1420
正戊基硼酸正丙基酯	1123	1124	1255	1217	1254	1340	1327
正戊基硼酸正丁基酯	1217	1210	—	1321	—	1441	1472
正戊基硼酸二甲基酯	—	968	1002	—	—	—	—
正己基硼酸二甲基酯	—	1052	1108		—	—	—
正庚基硼酸二甲基酯	—	1145	1212	·	—	—	—
正丁基硼酸二甲基酯	—	—	995	—	—	—	—
正丁基硼酸二乙基酯	—	984	—	—	—	—	—
正丁基硼酸二正丙基酯	—	1058	—		—	—	—
正丁基硼酸二正丙基酯	—	1153	1182	—	—	—	—
正丁基硼酸二正丁基酯	—	—	—	—	—	—	—
硼酸三乙基酯	—		960	—	—	—	—
硼酸三正丙基酯		—	1114	—	—	—	—

表 18-67　钒螯合物保留指数[3]

固定液	XE-51	SE-30	OV-17	真空润滑脂
I 柱温/℃ 化合物	130			110
$V—[CF_3—CO—CH—CO—CH_3]$	1550	1500	1750	1300
$V—[CF_3—CO—CH—CO—C(CH_3)_3]_3$	1700	1700	1700	1420
$V—[C_3H_7—CO—CH—CO—C(CH)_3]_3$	1720	1740	1570	1400
$V—O—[CF_3—CO—CH—CO—CH_3]_2$	1570	1530		—
$V—O—[CF_3—CO—CH—CO—C(CH_3)_3]_2$	—	1670	1780	—
$V—O—[C_3H_7—CO—CH—CO—C(CH)_3]_2$	1670	1710	1620	1400

表 18-68　镍锌配位体保留指数[31]

固定液：SE-30

I 柱温/℃ 化合物	270	242	I 柱温/℃ 化合物	270	242
镍(Ⅱ)双(*N*,*N*-二甲基二硫代氨基甲酸酯)	2833	—	锌(Ⅱ)双(*N*,*N*-二甲基二硫代氨基甲酸酯)	—	2548
镍(Ⅱ)双(*N*,*N*-二乙基二硫代氨基甲酸酯)	3007	—	锌(Ⅱ)双(*N*,*N*-二乙基二硫代氨基甲酸酯)	—	2728
镍(Ⅱ)双(*N*,*N*-二丙基二硫代氨基甲酸酯)	3277	—	锌(Ⅱ)双(*N*,*N*-二丙基二硫代氨基甲酸酯)	—	3013
镍(Ⅱ)双(*N*,*N*-二异丙基二硫代氨基甲酸酯)	3229	—	锌(Ⅱ)双(*N*,*N*-二异丙基二硫代氨基甲酸酯)		2951
镍(Ⅱ)双(*N*,*N*-二丁基二硫代氨基甲酸酯)	3618	—	锌(Ⅱ)双(*N*,*N*-二丁基二硫代氨基甲酸酯)	—	3358
镍(Ⅱ)双(*N*,*N*-二异丁基二硫代氨基甲酸酯)	3332	—	锌(Ⅱ)双(*N*,*N*-二异丁基二硫代氨基甲酸酯)	—	3086
镍(Ⅱ)双(*N*,*N*-二戊基二硫代氨基甲酸酯)	3969	—	锌(Ⅱ)双(*N*,*N*-二戊基二硫代氨基甲酸酯)	—	3706

表 18-69　内酯保留指数[3]

柱温：190℃

I 固定液 化合物	EGS-SX	Apiezon L	I 固定液 化合物	EGS-SX	Apiezon L
4-丁内酯	2275	1261	4-壬内酯	2705	1763
4-戊内酯	2360	1360	2-己内酯	2418	1455
4-己内酯	2447	1461	2-千内酯	2592	1657
4-庚内酯	2534	1562	2-甲基-4-戊内酯	2290	1389
4-辛内酯	2623	1663			

表 18-70 军事化学毒剂保留指数[45]

固定液	甲基硅氧烷	含5%苯基甲基硅氧烷	含50%苯基甲基硅氧烷	PEG 20M	含氰基丙基甲基硅氧烷
柱温/℃ *I* 化合物	120		130		110
3,3 二甲基-2-丁醇	720.6	737.0	843.5	1109.1	1265.3
二甲基亚砜	783.7	836.0	1145.8	1569.1	1999.9
甲基膦酸甲酯	838.7	875.9	1129.1	1493.5	1847.9
甲基砜	855.4	916.9	1255.0	1881.4	2304.0
氟代磷酸二异丙基酯	925.6	955.6	1117.6	1342.4	1646.1
1,4-二噻烷	1049.7	1090.7	1341.1	1618.9	1851.1
N-甲基双(2-氯乙基)胺	1058.5	1093.8	1283.4	1566.3	1841.2
磷酸三乙基酯	1081.4	1119.0	1362.1	1656.1	2011.2
硫二甘醇	1132.6	1181.3	1484.8	2351.9	-
3-喹核醇	1151.9	1181.1	1466.4	1936.2	2236.1
水杨酸甲酯	1174.7	1206.1	1426.7	1781.8	1998.3
2 氯乙酰苯	1240.9	1290.9	1581.4	2083.4	2422.0
三(2 氯乙基)胺	1351.0	1404.5	1657.8	2070.4	2398.7
磷酸三丁酯	1613.4	1650.5	1878.6	2114.2	—

表 18-71 部分有机化合物保留指数（一）[1]

固定液	Apiezon L			Emulphor-O		
柱温/℃ *I* 化合物	70	130	190	70	130	190
戊烷	500	500	—	500	500	—
庚烷	700	700	—	700	700	—
壬烷	—	900	900	—	900	900
十一烷	—	1100	1100	—	1100	1100
2-甲基戊烷	570	571		568	570	—
2,3-二甲基丁烷	570	572	-	567	570	—
2,2,4 三甲基戊烷	690	694	—	685	693	—
1-戊烯	485	479		520	526	—
1-己烯	587	583	—	622	627	—
1-庚烯	687	684	-	721	726	—
1 辛烯	—	783	779	818	827	—
2 甲基 1 丁烯	500	499	-	541	544	—
3 甲基-1-丁烯	450	448	-	484	489	—
2 甲基-2-丁烯	527	526	—	566	570	—
反-4-甲基-2-戊烯	557	559	—	590	592	—
顺-4-甲基-2-戊烯	558	560	—	590	594	—
异戊二烯	51[illegible]	514	—	595	599	—
二乙醚	476	484		574	578	
二丙醚	66[illegible]	664	—	737	742	—
二丁醚	—	858	862	—	934	938
二戊醚		1052	1057	—	1131	1132
二异丙基醚	570	568	—	638	630	—
2-乙基-1-丁醇	—	802	806	—	1160	1149
2-乙基-1-己醇	—	986	990	—	1341	1330
丙酮	447	450	—	702	708	—
2 丁酮	547	551	—	784	792	—

续表

固定液	Apiezon L			Emulphor-O		
I 柱温/℃ 化合物	70	130	190	70	130	190
2-戊酮	638	644	—	862	878	—
2-己酮	—	747	752	—	979	1001
2-庚酮	—	846	853	—	1079	1103
2-辛酮	—	947	953	—	1178	1202
2-壬酮	—	1047	1055	—	1277	1301
2-癸酮	—	1148	1154	—	—	—
2-十一酮	—	1247	1256	—	—	—
3-戊酮	647	651	—	873	884	—
3-己酮	—	746	751	—	966	973
3-庚酮	—	847	852	—	1061	1078
3-辛酮	—	948	952	—	1159	1180
4-庚酮	—	833	838	—	1043	1055
5-壬酮	—	1035	1039	—	1238	1256
6-十一碳酮	—	1231	1237	—	1436	1452
3-甲基-2-丁酮	605	627	—	834	849	—
4-甲基-2-戊酮	688	706	—	908	923	—
5-甲基-2-己酮	807	812	—	—	1050	—
3,3-二甲基-2-丁酮	665	672	—	865	883	—
2,4-二甲基-2-戊酮	749	756	—	—	939	948
2,6-二甲基-4-庚酮	—	935	943	—	1108	1121
乙腈	439	447	—	849	853	—
丙腈	510	524	—	880	892	—
丁腈	—	619	—	—	970	990
戊腈	—	721	—	—	1066	1086
己腈	—	822	829	—	1164	1187
硝基甲烷	483	487	—	964	967	—
硝基乙烷	585	590	—	—	992	997
硝基丙烷	677	686	—	—	1064	1080
硝基丁烷	—	791	800	—	1149	1167
硝基戊烷	—	896	905	—	1237	1257
甲酸甲酯	370	362	—	643	637	—
甲酸乙酯	468	455	—	717	714	—
甲酸-1-丙醇酯	570	574	—	804	814	—
甲酸-2-丙醇酯	532	525	—	748	754	—
甲酸-1-丁醇酯	679	680	—	910	913	—
甲酸-2-丁醇酯	632	631	—	850	855	—
甲酸-2-甲基-1-丙醇酯	639	642	—	862	868	—
甲酸-2-甲基-2-丙醇酯	585	589	—	790	795	—
甲酸-1-戊醇酯	781	787	—	—	1014	1017
甲酸-3-甲基-1-丁醇酯	739	748	—	—	975	986
乙酸甲酯	475	468	—	719	717	—
乙酸乙酯	537	547	—	784	779	—
乙酸-1-丙醇酯	654	648	—	867	874	—
乙酸-2-丙醇酯	596	588	—	793	798	—
乙酸-1-丁醇酯	757	755	—	—	971	981
乙酸-2-丁醇酯	697	692	—	—	895	—
乙酸-2-甲基-1-丙醇酯	711	713	—	—	921	—

续表

固定液	Apiezon L			Emulphor-O		
柱温/℃ I 化合物	70	130	190	70	130	190
乙酸-2-甲基-2-丙醇酯	640	636	—	817	820	—
乙酸-1-戊醇酯	—	855	856	—	1072	1084
乙酸-3-甲基-1-丁醇酯	—	819	—	—	1028	1039
丙酸甲酯	578	572	—	800	802	—
丙酸乙酯	654	645	—	859	859	—
丙酸-1-丙醇酯	752	751	—	—	951	
丙酸-2-丙醇酯	685	683	—	872	876	—
丙酸-1-丁醇酯	—	851	853	—	1047	1058
丙酸-2-丁醇酯	—	784	—		970	973
丙酸-2-甲基-1-丙醇酯	—	808	—	—	999	1002
丙酸-2-甲基-2-丙醇酯	727	725	—	886	889	—
丙酸-1-戊醇酯		949	950	—	1148	1156
丙酸-3-甲基-1-丁醇酯	—	914	918	—	1104	1115
丁酸甲酯	669	665	—	882	885	—
丁酸乙酯	740	738	—	—	944	—
丁酸-1-丙醇酯	—	840	—	—	1034	1039
丁酸-2-丙醇酯	776	774	—	953	959	—
丁酸-1-丁醇酯	—	940	937	—	1127	1142
丁酸-2-丁醇酯	—	877	874	—	1052	1059
丁酸-2-甲基-1-丙醇酯	—	900	900	—	1080	1090
丁酸-2-甲基-2-丙醇酯	—	815	—	—	971	979
丁酸-1-戊醇	—	1039	1039	—	1226	1239
丁酸-3-甲基-1-丁醇酯	—	1002	1007	—	1185	1193
异丁酸甲酯	616	610	—	826	825	—
异丁酸乙酯	699	693	—	—	881	—
异丁酸-1-丙醇酯	—	790	—	—	974	—
异丁酸-2-丙醇酯	729	723	—	—	897	—
异丁酸-1-丁醇酯	—	894	898	—	1065	1079
异丁酸-2-丁醇酯	—	829	827	—	987	993
异丁酸-2-甲基-1-丙醇酯	—	855	856	—	1021	1025
异丁酸-2-甲基-2-丙醇酯	—	763	—	—	902	910
异丁酸-1-戊醇酯	—	989	996	—	1164	1175
异丁酸-3-甲基-1-丁醇酯	—	954	960	—	1126	1135
环戊烷	571	587	—	604	627	—
环己烷	676	700	—	704	734	—
环庚烷	—	846	874	—	883	919
环辛烷	—	979	1011	—	1020	1060
环壬烷	—	1093	1132	—	1137	1186
环癸烷	—	1198	1238	—	1245	1293
环十一烷	—	1292	1334	—	1338	1387
环十二烷	—	1384	1430	—	1431	1482
反十氢化萘	—	1125	1166	—	1165	1207
顺十氢化萘	—	1170	1213	—	1219	1267
甲基环戊烷	635	651	—	661	684	—
甲基环己烷	738	760	—	762	788	—
甲基环庚烷	—	908	938	—	939	975
甲基环辛烷	—	1019	1052	—	1054	1091

续表

固定液 / 化合物 \ I \ 柱温/℃	Apiezon L			Emulphor-O		
	70	130	190	70	130	190
环戊烯	565	581	—	642	659	—
环己烯	695	714	—	764	787	—
环庚烯	—	840	864	—	918	942
环辛烯	—	945	985	—	1026	1059
1-甲基-1-环戊烯	—	675	683	—	740	753
1-甲基-1-环己烯	—	807	816	—	866	887
1-甲基-1-环庚烯	—	909	930	—	976	1003
1-甲基-1-环辛烯	—	1023	1048	—	1092	1121
氯环戊烷		804	827	—	967	995
氯环己烷		922	952	—	1085	1119
氯环庚烷	—	1069	1106	—	1237	1278
氯环辛烷	—	1197	1237	—	1371	1411
溴环戊烷	—	905	933	—	1075	1105
溴环己烷	—	1023	1056	—	1189	1231
溴环庚烷	—	1157	1203	—	1333	1386
溴环辛烷	—	1258	1304		1432	1486
环戊酮	—	766	785	—	1072	1101
环己酮	—	886	909	—	1171	1206
环庚酮	—	1009	1038	—	1299	1343
环辛酮	—	1115	1158	—	1405	1455
2-甲基环己酮	—	937	971	—	1208	1246
3-甲基环己酮	—	943	965	—	1205	1244
4-甲基环己酮	—	950	973		1231	1278
环戊醇	—	768	773	—	1135	1135
环己醇	—	880	898	—	1242	1247
环庚醇	—	1022	1052	—	1385	1403
环辛醇	—	1155	1189	—	1520	1548
1-甲基-1-环戊醇	—	770	782	—	1091	1096
1-甲基-1-环己醇	—	882	906	—	1192	1203
1-甲基-1-环庚醇	—	1009	1036	—	1335	1359
1-甲基-1-环辛醇	—	1121	1156	—	1445	1474
硝基环己烷	—	1083	1119	—	1385	1466
四氢呋喃	618	631	—	780	800	—
四氢吡喃	697	714	—	—	870	897
苯	—	691	—	—	862	884
萘	—	1263	1292	—	1531	1585
薁	—	1399	1419	—	1707	1763
甲苯	—	798	816	—	963	984
乙基苯	—	893	913	—	1053	1076
丙基苯	—	978	998	—	1136	1161
邻二甲苯	—	930	953	—	1090	1128
间二甲苯	—	904	924	—	1056	1086
对二甲苯	—	904	923	—	1051	1081
异丙基苯		947	966	—	1104	1125
对伞花烃		1051	1072	—	1199	1223
苯乙烯	—	929	949	—	1128	1169
氯代苯	—	681	—	—	879	—

续表

固定液	Apiezon L			Emulphor-O		
I 柱温/℃ 化合物	70	130	190	70	130	190
氯代苯	—	835	914		1099	1134
溴代苯	—	982	1019	—	1210	1257
碘代苯		1 04	1152		1352	1405
邻二氯苯	—	1076	1117	—	1126	1375
间二氯苯	—	1058	1097	—	1275	1320
对二氯苯	—	1060	1096	—	1288	1335
邻氯甲苯	—	996	1024	—	1194	1231
间氯甲苯	—	995	1025	—	1205	1241
对氯甲苯		996	1026		1206	1241
邻溴甲苯	—	1091	1129	—	1306	1352
间溴甲苯	—	1095	1130	—	1319	1362
对溴甲苯	—	1094	1132	—	1321	1364
苄基溴	—	1125	1161	—		
2-溴-1-苯基乙烷	—	1219	1257	—	1529	1585
苯基氰	—	965	993	—	1406	1444
苯基乙腈	—	1097	1127	—	1646	1686
苯甲醚	—	930	949		1200	1231
苯乙醚	—	996	1013	—	1246	1276
硝基苯	—	1088	1131	—	1499	1536
邻硝基甲苯	—	1155	1190	—	1547	1588
间硝基甲苯	—	1201	1237	—	1592	1639
对硝基甲苯	—	1212	1258	—	1615	1668
苯甲醛	—	965	996	—	1336	1371
苯乙醛	—	1029	1057	—	1130	1165
苯基丙醛	—	1146	1174	—	1546	1584
间甲苯醛	—	1081	1108	—	1429	1470
对甲苯醛	—	1089	1122	—	1149	1190
苯乙酮		1067	1095	—	1445	1479
苯丙酮	—	1164	1189	—	1518	1556
苯丁酮	—	1240	1271	—	1583	1621
1-苯基-2-丙酮	—	1098	1127	—	1499	1538
1-苯基-2-丁酮	—	1192	1223	—	1583	1623
1-苯基-3-丁酮	—	1214	1243	—	1622	1654
苄醇	—	1010	1044	—	1573	1598
2-苯基乙醇	—	1089	1128	—	1610	1644
3-苯基丙醇	—	1207	1234	—	1716	1757
1-苯基-1-乙醇	—	1042	1071	—	1558	1577
2-苯基-2-丙醇	—	1076	1099	—	1540	1562

表 18-72 部分有机化合物保留指数（二）[20]

固定液：$C_{87}H_{176}$

柱温/℃	70	130	190	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	柱温/℃	70	130	190	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
保留指数 化合物	I				保留指数 化合物	I			
四氢呋喃	602.6	612.9	623.2	1.71	噻吩	664.6	685.3	706.0	3.45
二噁烷	660.3	675.0	689.7	2.45	四甲基硅烷	429.4	427.1	424.8	−0.38

表 18-73　部分有机化合物保留指数（三）[20]

固定液	SE-30						XE-60					
I 柱温/℃ 化合物	40	60	150	160	170	180	40	60	150	160	170	180
苯	648	647	-	-	—	-	776	770	-	—	-	—
1,2,4-三氯苯	--	—	1151	1166	-	—	—	-	1416	1432	—	—
苯乙酮	-	—	1049	1047	-	—	—	-	1448	1455	—	—
2,4,5-三氯苯乙酮	-	—	1463	1481	1486	1474	—	—	1960	1972	1990	2000
2,4,5 三氯苯基-1-乙醇	—	—	1543	1556	1563	1559	—	-	2155	2171	2179	2207
2,4,5-三氯苯乙酮基氯化物		—	1627	1647	1648	1646	-	—	2227	2252	2264	2313
2,4,5-三氯苯基-2-氯-1-乙醇	—	-	1711	1723	1732	1730	—	—	—	2443	2450	2497

表 18-74　部分有机化合物保留指数（四）[49]

固定液	PEG-40M	DS 10	SE-30	OV-215	固定液	PEG-40M	DS 10	SE-30	OV-215
I 柱温/℃ 化合物	80	100	100	80	I 柱温/℃ 化合物	80	100	100	80
甲醇	938	883	384	550	戊醛	1038	924	679	963
乙醇	975	947	427	618	2-丙酮	884	785	475	799
丙醇	1078	1048	530	718	2-丁酮	968	858	579	888
2 丙醇	959	964	480	656	2-戊酮	1043	937	671	980
丙烯-2 醇	1156	1035	534	698	3-甲基-2-丁酮	996	895	646	949
丁醇	1182	1161	637	827	4-甲基-2-丁酮	1070	974	724	1034
2 丁醇	1055	1054	586	755	3,3-二甲基-2-丁酮	1013	924	698	999
特丁醇	923	969	493	689	2-己酮	1113	993	768	1053
异丁醇	1122	1095	601	791	环己酮	—	1328	900	—
戊醇		1268	754	—	甲基环己酮	-	1378	954	—
异戊醇	—	1233	725	—	2,4 戊二酮	—	1177	843	-
己醇	—	1373	854	—	甲酸乙酯	876	770	501	733
庚醇	—	1479	955		乙酸乙酯	939	879	594	833
2,2,2-三氯乙醇	—	1504	862	—	丙酸乙酯	1008	939	691	913
环戊醇	—	1326	792	—	丁酸乙酯	1085	1022	781	1001
环己醇	—	1461	891	—	乙酸丙酯	1024	974	693	941
酚	-	1618	926	—	乙酸丁酯	1119	1068	792	1041
苄醇	—	1645	1017	-	乙酸乙烯酯	934	785	564	788
硝基甲烷	1209	886	536	926	甲基丙烯醛甲酯	1052	918	694	908
硝基丙烷	1265	994	712	1106	丙烯酸乙酯	1045	925	676	903
2-硝基丙烷	1178	927	676	1070	丙烯酸正丁酯	1227	1114	873	1102
丙烯腈	1041	764	500	843	丙烯酸异丁酯	1165	1060	835	1067
乙腈	1069	803	464	863	二氯甲烷	953	683	524	657
丙腈	1092	858	547	948	三氯甲烷	1043	757	609	700
丁腈	1162	935	642	1042	四氯甲烷	906	720	672	724
戊腈	1255	1031	745	1151	1,2-二氯乙烷	1110	835	640	822
吡啶	1242	1078	743	1009	1,1,1-三氯乙烷	914	730	650	757
乙醛	752	632	369	640	三氯乙烯	1023	803	698	797
丙醛	845	728	480	754	四氯乙烯	1057	890	814	896
丙烯醛	908	735	469	757	溴乙烷	798	627	522	655
丁醛	933	821	574	856	溴丙烷	1011	830	715	838

续表

固定液	PEG-40M	DS 10	SE 30	OV-215	固定液	PEG-40M	DS 10	SE-30	OV-215
柱温/℃ / I / 化合物	80	100	100	80	柱温/℃ / I / 化合物	80	100	100	80
碘丁烷	1101	924	814	941	甲基环己烷	792	765	736	769
表氯醇	1253	1039	700	999	己烯基环己烯	1041	891	840	892
苯	985	744	664	790	环庚烯	—	851	797	—
甲苯	1082	848	767	895	辛烯	850	794	790	813
乙基苯	1166	937	859	986	辛炔	1052	845	811	876
苯乙烯	1297	994	886	1061	反 1,2-二叔丁基乙烯	734	744	793	804
丙基苯	1244	1020	950	1077	呋喃	832	571	498	615
异丙基苯	1209	989	921	1041	四氢呋喃	925	911	626	820
对二甲苯	1174	948	868	1001	1,3-二氧戊烷	1026	946	597	824
氯苯	—	977	844	—	1,4 二噁烷	1130	1092	721	940
1,2,4 三氯苯	—	1400	1186	—	苯甲醚	—	1095	916	—
茚	—	1226	1059	—	二乙醚	656	579	496	561
环戊烷	647	596	577	596	二-异丙基醚	672	611	594	653
环戊烯	701	597	565	591	甲基叔丁基醚	721	652	562	670
环己烷	746	709	675	704	乙醛-二乙基醛	923	818	717	809
环己烯	839	737	690	729					

表 18-75 部分有机化合物保留指数（五）[51]

固定液：Carbowax 20M

柱温/℃ / I / 化合物	70	80	90	100	110	120
丁醇	—	—	1135.08	1133.33	1130.99	1129.04
2-甲基-1-丁醇	1203.38	1201.50	1200.40	1197.78	1196.36	1194.93
正己醇	—	—	1348.98	1347.99	1346.20	1344.79
正辛醇	—	—	1556.05	1555.68	1554.38	1553.35
苯	957.21	960.69	964.88	968.66	972.80	976.91
甲苯	1053.89	1057.98	1062.76	1067.04	1071.62	1076.10
对二甲苯	1145.24	1149.89	1152.22	1159.94	1165.00	1169.77
间二甲苯	1151.54	1156.28	1161.65	1166.41	1171.52	1176.29
邻二甲苯	1192.98	1198.32	1204.40	1209.84	1215.66	1221.09
癸酸甲酯	1192.75	1193.97	1195.19	1196.38	1197.50	1198.76
丙酸庚酯	—	—	1444.07	1445.70	1446.66	1447.76

表 18-76 部分有机化合物保留指数（六）[52]

固定液：苯二甲酸二壬酯　　柱温：75℃

化合物	I	化合物	I	化合物	I
1-碘-2-甲基丙烷	851	二正丁基醚	900	1-丁醇	795
1-碘丙烷	788	辛炔-2	772	2-丁醇	720
2-溴丙烷	646	1-氯-2-甲基丙烷	670	2-甲基-1-丙醇	754
1-溴丙烷	693	乙酸正丁酯	871	2-甲基-2-丙醇	638
2,2,4-三甲基内烷	691	2-戊酮	775	正丙基腈	805
二异丙基醚	620	1-硝基丙烷	882		

表 18-77　部分有机化合物保留指数（七）[60]

柱温：60°C

I　固定液 化合物	SPB-1	Supelcowax 10	I　固定液 化合物	SPB-1	Supelcowax 10
乙醇	388	914	三氯乙烯	675	1010
丙酮	405	832	2-乙氧基乙醇	687	1231
2-丙醇	412	935	甲苯	757	1057
1-丙醇	428	1046	乙酸异丁基酯	757	1025
二氯甲烷	439	946	乙酸正丁基酯	796	1082
2-丁酮	482	919	四氯乙烯	801	1038
乙酸乙酯	496	902	4-羟基甲基-2-戊酮	813	1374
三氯甲烷	501	1034	5-甲基-2-己酮	836	1150
2-丁醇	520	1095	乙基苯	848	1138
2-甲氧基乙醇	533	1184	对二甲苯	856	1145
1,2-二氯乙烷	552	1080	间二甲苯	856	1151
乙酸异丙基酯	584	911	环己酮	861	1301
1-丁醇	584	1116	乙酸异戊酯	862	1131
苯	598	964	邻二甲苯	878	1193
2-硝基丙烷	631	1129	乙酸-2-乙氧基乙酯	882	1319
1,2-二氯丙烷	658	1058	2-丁氧基乙醇	888	1416

表 18-78　部分有机化合物保留指数（八）[37]

化合物	I^q	化合物	I^r
乙酰胆碱　Acetylcholine	NO⑥	联苯　Biphenyl	1389
乙酰三丁基柠檬酸酯　Acetyltributyl citrate	2253	4,4-二吡啶基二水合物　4,4-Bipyridyl dihydrate	1507
乙酰三乙基柠檬酸酯　Acetyltriethyl citrate	1730	Bisoflex 1001④	MP
腺嘌呤（脱氨）酶　Adenine	NO	1-溴癸烷　1-Bromodecane	1326
艾氏剂④　Aldrin	1950②	溴萘　Bromonaphthalene	1434
Alphanol 610④　Alphanol 610(esters of C6-10 linear alcohols)	MP②	硝滴涕④⑧　Bulan	2310⑥
		油酸 2 丁氧基乙基酯　2-Butoxyethyl oleate	MP
3-氨基-2-二甲基苯　3-Amino-2-dimethylbenzene	1178	丁化的羟基苯甲醚　Butylated hydroxyanisole	1462
5-氨基喹啉　5-Aminoquinoline	1598	丁化的羟基甲苯　Butylated hydroxytoluene	1490
茴香脑　Anethole	1284	邻苯二甲酸丁基苄基酯　Butylbenzyl phthalate	2327
吖嗪缩苯胺⑩　Anilazine	2010	癸二酸丁基苄基酯　Butylbenzyl sebacate	1585
蒽　Anthracene	1711		2130
9,10-二腈蒽　9,10-Anthracenedicarbonitrile	2288		2520
阿特拉津⑧　Atrazine	1705③	环氧硬脂酸丁酯　Butyl epoxystearate	MP
谷硫磷⑧　Azinphosmethyl	2430③	邻苯二甲酸丁基异癸基酯　Butylisodecyl phthalate	1950
偶氮苯　Azobenzene	1556	油酸丁酯　Butyl oleate	MP
Barkite B④	MP	丁基-2-苯基-5-(4-联苯基)-1,3,4-噁二唑　Butyl-2-phenyl-5-(4-biphenylyl)-1,3,4 oxadiazole	3342
2,5-二-(4-二苯噁唑)　BBO 2,5-Di-(4-biphenyloxazole)	3710	邻苯二甲酸丁基己基酯　Butylsextyl phthalate	1940
2,5-双(5′叔丁苯噁唑[2′]噻吩)　BBOT	2745		2235
	3750	硬脂酸丁酯　Butyl stearate	2157
二苯甲酮　Benzophenone	1611		2362
苯甲醇　Benzyl alcohol	1016	1,5-戊二胺　Cadaverine	1035
苯甲酸苄酯　Benzyl benzoate	1738	樟脑　Camphor	1137
α-六六六⑧　α-BHC	1690③	克菌丹⑧　Captan⑧	2000③
β-六六六⑧　β-BHC	17.0③	咔唑　Carbazole	1784
δ-六六六⑧　δ-BHC	1755③	三硫磷⑧　Carbophenothion⑧	2255③

续表

化 合 物	I
蓖麻油 Castor oil	MP
卓克死[⑧] CDEC[⑧]	1685[③]
Chorobenside Chlorobenside[⑧]	2040
开蓬[⑧] Chlordecone	2240[③]
邻氯亚苄基丙二腈[⑧] o-Chlorobenzylidenemalonitrile	1516
5α-胆甾烷 5α-Cholestane	2852
胆甾醇 Cholesterol	3008
胆碱 Choline	NO
柠檬醛 Citral	1272
乙酰基柠檬酸三丁酯 Cittoflex A4[⑧]	2224
甲苯基苯基磷酸酯 Cresylphenyl phosphate	MP
环十二烷酮[⑧] Cyclododecanone[⑧]	1524
邻苯二甲酸环己基异辛基酯 Cyclohexylisooctyl phthalate	2146
	2532
邻苯二甲酸环己基十三基酯 Cyclohexyltridecyl phthalate	2518
2,4-滴丁基酯[⑧] 2,4-D butyl ester	1840[③]
2,4-滴异丁基酯[⑧] 2,4-D isobutyl ester	1805[⑧]
2,4-滴异丙基酯[⑧] 2,4-D isopropyl ester	1700[③]
2,4-滴甲基酯[⑧] 2,4-D methyl ester	1605[③]
敌草索[⑧] DCPA	1960[③]
滴滴埃甲基酯 DDA methyl ester	2085[③]
o,p'-DDE[⑧]	2070[③]
p,p'-DDE[⑧]	2130[③]
o,p'-DDT[⑧]	2220[③]
p,p'-DDT[⑧]	2290[③]
甲基一〇五九[⑧] Demeton-S-methyl[⑧]	1628
己二酸二烷基酯 Dialkyl adipate 79[⑧]	MP
邻苯二甲酸二烯丙基酯 Diallyl phthalate	1698
邻苯二甲酸二链烷醇酯 Dialphanol phthalate	MP
癸二酸二链烷醇酯 Dialphanol sebacate	MP
邻苯二甲酸二戊基酯 Diamyl phthalate	2140
二嗪磷[⑧] Diazinon	1760[③]
邻苯二甲酸二苄基酯 Dibenzyl phthalate	2690
癸二酸二苄基酯 Dibenzyl sebacate	2135
间二溴苯 m-Dibromobenzene	1197
邻二溴苯 o-Dibromobenzene	1221
对二溴苯 p-Dibromobenzene	1193
己二酸对二丁氧基乙氧基乙基酯 p-Dibutoxyethoxyethyl adipate	1285
二(丁氧基乙基)邻苯二甲酸酯 Di-(butoxyethyl)phthalate	2850
二-(丁氧基乙基)癸二酸酯 Di-(butoxyethyl)sebacate	2700
己二酸二丁酯 Dibutyl adipate	1660
马来酸二丁酯 Dibutyl maleate	1505
邻苯二甲酸二正丁酯 Di-n-butyl phthalate	1924
癸二酸二丁酯 Dibutyl sebacate	2137
对苯二酸二正丁酯 Di-n-butyl terephthalate	2066
二月桂酸二丁锡酯 Dibutyltin dilaurate	NO
二氯萘醌[⑧] Dichlone	1760[③]
对二氯苯[⑧] p-Dichlorobenzene	1000
己二酸二环己基酯 Dicyclohexyl adipate	2282
乙二酸二环己基酯 Dicyclohexyl oxalate	1880
邻苯二甲酸二环己基酯 Dicyclohexyl phthalate	2461
狄氏剂[⑧] Dieldrin	2100[③]
己二酸二(乙氧基乙基)酯 Di(ethoxyethyl)adipate	1880
邻苯二甲酸二(乙氧基乙基)酯 Di(ethoxyethyl)phthalate	2135
癸二酸二(乙氧基乙基)酯 Di(ethoxyethyl)sebacate	2270
己二酸二乙基酯 Diethyl adipate	1349
己二酸二(2-乙基己基)酯 Di(2-ethylhexyl)adipate	2381
异苯二甲酸二(2-乙基己基)酯 Di(2-ethylhexyl) isophthalate	2730
邻苯二甲酸二(2-乙基己基)酯 Di(2-ethylhexy.)phthalate	2507
癸二酸二(2-乙基己基)酯 Di(2-ethylhexyl)sebacate	2792
马来酸二乙基酯 Diethyl maleate	1081
邻苯二甲酸二乙基酯 Diethyl phthalate	1568
癸二酸二乙基酯 Diethyl sebacate	1746
N,N-二乙基-N,N-甲苯酰胺[⑧] N,N-Diethyl-N,N-toluamide	1571
邻苯二甲酸二庚基酯 Diheptyl phthalate	2500
9,10-二羟蒽 9,10-Dihydroanthracene	1662
己二酸二异丁基酯 Diisobutyl adipate	1660
邻苯二甲酸二异丁基酯 Diisobutyl phthalate	1863
对苯二酸二异丁基酯 Diisobutyl terephthalate	1972
己二酸二异癸基酯 Diisodecyl adipate	2745
邻苯二甲酸二异癸基酯 Diisodecyl phthalate	2511
邻苯二甲酸二异庚基酯 Diisoheptyl phthalate	MP
己二酸二异辛基酯 Diisooctyl adipate	MP
环氧硬脂酸二异辛基酯 Diisooctyl epoxystearate	MP
马来酸二异辛基酯 Diisooctyl maleate	MP
邻苯二甲酸二异辛基酯 Diisooctyl phthalate	MP
癸二酸二异辛基酯 Diisooctyl sebacate	MP
乐果[⑧] Dimethoate	1720
邻苯二甲酸二甲氧基乙基酯 Dimethoxyethyl phthalate	1980
己二酸二甲基酯 Dimethyl adipate	1223
对二甲基氨基苯甲醛 p-Dimethylaminobenzaldehyde	1528
异苯二甲酸二甲基酯 Dimethyl isophthalate	1488
α,α-二甲基-β-甲基琥珀酰替苯胺 α,α-Dimethyl-β-methylsuccinanilide	1195
邻苯二甲酸二甲基酯 Dimethyl phthalate	1434
1,4-二甲基-双-2-(5-苯基噁唑基)苯 Dimethyl POPOP	3618
2,4-二甲基喹啉 2,4-Dimethyl quinoline	1446
2,7-二甲基喹啉 2,7-Dimethyl quinoline	1425

续表

化 合 物	I'
癸二酸二甲基酯 Dimethyl sebacate	1645
对苯二酸二甲基酯 Dimethyl terephthalate	1475
己二酸二壬基酯 Dinonyl adipate	2484
邻苯二甲酸二壬基酯 Dinonyl phthalate	2649
己二酸二辛基酯 Dioctyl adipate	2383
邻苯二甲酸二辛基酯 Dioctyl phthalate	2519
癸二酸二辛基酯 Dioctyl sebacate	2782
己二酸二正癸基酯 Di(*n*-decyl)adipate	2905
己二酸二苯基酯 Diphenyl adipate	2397
二苯基汞 Diphenyl mercury	1873
邻苯二甲酸二苯基酯 Diphenyl phthalate	2550
己二酸二丙基酯 Dipropyl adipate	1545
邻苯二甲酸二丙基酯 Dipropyl phthalate	1743
马来酸二己基酯 Disextyl maleate	2116
邻苯二甲酸二(十三烷基)酯 Ditridecyl phthalate	NO
敌菌灵[a] Dyrene	2010[③]
硫丹 I[a] Endosulfan I	2085[③]
硫丹 II[a] Endosulfan II	2175[③]
异狄氏剂[a] Endrin	2165
乙醇胺 Ethanolamine	780
乙硫磷[a] Ethion	222[a]
乙胺 Ethylamine	NO
乙滴滴[a] Ethylan	2175
苯甲酸乙酯 Ethylbenzoate	1227
油酸乙酯 Ethyl oleate	2175
5-乙基-5 对甲苯基巴比土酸 5-Ethyl-5 *p*-tolyl barbituric acid	2085
丁子香酚 Eugenol	1368
芴 Fluorene	1580
芴酮 Fluorenone	1705
Foper[a]	2015[③]
二苯甲酸甘油基酯 Glyceryl dibenzoate	2442
丙三醇 Glycerol	NO
哈尔满 Harman	2000
七氯[a] Heptachlor	1890[③]
环氧七氯[a] Heptachlor epoxide	2015[③]
六苯基苯 Hexaphenyl benzene	NO
Howflew GBP[a]	1947
1-羟氯丹[a] 1-Hydroxychlordene	1955[③]
1-羟哈尔满 1-Hydroxyharman	1920 2015 2290
咪唑 Imidazole	1095
茚 Indene	1662
吲哚 Indole	1276
靛红 Isatin	1712
邻苯二甲酸异丁基环己基酯 Isobutylcyclohexyl phthalate	1868 2159[a] 2453
3 异丁基 1 甲基黄嘌呤 3-Isobutyl-1 methyl xanthine	2150
邻苯二甲酸异丁基己基酯 Isobutylsextyl phthalate	MP
邻苯二甲酸异庚基环己基酯 Isoheptylcyclohexyl phthalate	MP
环氧硬脂酸异辛基酯 Isooctyl epoxystearate	MP
邻苯二甲酸异辛基异癸基酯 Isooctylisodecyl phthalate	MP
Lankroflex 79LP[a]	MP
Lankroflex 79LTM[a]	MP
苧烯 Limonene	1053
高丙体六六六[a] Lindane	1757[a]
Linevcl 79 phthalate[a]	MP
Linevcl 911 phthalate[a]	MP
亚麻子油 Linseed oil	MP
液体石蜡 Liquid paraffin	MP
马拉松[a] Malathion	1900[a]
2-巯基苯并噁唑 2 Mercaptobenzoxazole	NO
2-巯基苯并咪唑 2-Mercaptobenzimicazole	NO
2-巯基苯并噻唑 2-Mercaptobenzothiazole	1936
甲氧滴滴涕[a] Methoxychlor	2410[a]
氨茴酸甲酯 Methyl anthranilate	1343
辛酸甲酯 Methyl caprylate	1130
癸酸甲酯 Methyl decanoate	1305
磷酸甲基二苯基酯 Methyldiphenyl phosphate	MP
对羟苯甲酸甲酯 Methyl *p* hydroxybenzoate	1419
亚油酸甲酯 Methyl linoleate	2100
2-甲基萘 2-Methylnaphthalene	1313
壬酸甲酯 Methyl nonanoate	1215
油酸甲酯 Methyl oleate	2086
棕榈酸甲酯 Methyl palmitate	1867
5-甲基-5-苯基海因 5-Methyl 5-phenylhydantoin	1866
5-(对甲基苯基)-5-苯基海因 5(*p*-Methylphenyl) 5-phenylhydantoin	2457
硬脂酸甲酯 Methyl stearate	2116
速灭灵[a] Mevinphos	1450[a]
灭蚁灵[a] Mirex	2470[a]
单甲苯基二苯基磷酸酯 Monocresyldiphenyl phosphate	MP
吗啉 Morpholine	810
萘 Naphthalene	1186
1-萘甲腈 1-Naphthonitrile	1489
2-萘基乙酸酯 2-Naphthyl acetate	1585
菸酰胺 Nicotinamide	1475
去甲哈尔满 Norharman	2005
己二酸辛基癸基酯 Octyldecyl adipate	2540 2745 2940

续表

化合物	I[1]
4-叔辛基-2-甲基-环己基乙酸酯 4 *tert*. Octyl-2-methyl-cyclohexyl acetate	1611
油酸酰胺 Oleamide	MP
对硫磷[8] Parathion	1935[8]
甲基对硫磷[8] Parathion methyl	1845
乙滴滴[8] Perthane	2175[8]
吩嗪 Phenazine	1703
1-苯基乙基胺 1-Phenylethylamine	1050
2-苯基乙基胺 2-Phenylethylamine	1125
甲拌磷[8]	1675[3]
哌啶 Phorate	790
环氧大豆油 Piperidine	MP
Pliabrac 519[4]	MP
Pliabrac 521[4]	MP
Pliabrac 524[4]	MP
Pliabrac 985[4]	MP
Pliabrac 987[4]	MP
Pliabrac 989[4]	MP
Pliabrac 990[4]	MP
1,4-双(5-苯基噁唑基-2)苯 POPOP	3525
2,5-二苯基噁唑 PPO	2050
普拉西泮 Prazepam	2610
硝滴滴[8] Prolan	2250[8]
丙烯乙二醇己二酸酯 Propylene glycol adipate	MP
丙基对羟基苯甲酸酯 Propyl-p-hydroxybenzoate	1567
芘 Putrescine	930
Pyrene	1983
吡苄明 Pyribenzamine	1980
吡咯烷 Pyrrolidine	695
喹啉 Quinoline	1247
皮蝇磷[8] Ronnel	1880[3]
Santicizer 141[4]	2410[3]
Santicizer 148[4]	MP
SKF 525A[4]	2326
西玛津[8] Simazine[8]	1690[3]
豆甾醇 Stigmasterol	3234
反芪 *trans* Stilbene	1755
2,4,5-涕异丙酯[8] 2,4,5-T isopropyl ester[8]	1825[3]
2,4,5-涕甲酯[8] 2,4,5-T methyl ester[8]	1740[3]
滴滴滴 *o,p'*-异构物[8] TDE *o,p'*-isomer[8]	2130
滴滴滴 *p,p'*-异构物[8] TDE *p,p'*-isomer[8]	2200
对联三苯 *p*-Terphenyl	2208
松油醇(异构体混合物) Terpineol(mixed isomers)	1127

化合物	I[1]
	1170 1183
杀虫畏乙异构物[8] Tetrachlorvinphos Z-isomer[8]	2084
三氯杀螨砜[8] Tetradifon[8]	2430[3]
油酸氢糠酯 Tetrahydrofurfuryl oleate	2290 2480 2660
四苯乙烯 Tetraphenylethylene	2478
硫茚 Thianaphthene	1200
噻蒽 Thianthrene	1901
甘油三乙酸酯 Triacetin	1282
甘油三丁酸酯 Tributyrin	1552
三(2-氯乙基)磷酸酯 Tri(2-chloroethyl)phosphate	1740
三苄胺 Tribenzylamine	2271
三丁基柠檬酸酯 Tributyl citrate	2150
三丁基磷酸酯 Tributyl phosphate	1690
三甲苯基磷酸酯 Tricresyl phosphate	2695
三乙基柠檬酸酯 Triethyl citrate	1655
三(2-乙基己基)磷酸酯 Tri(2-ethylhexyl)phosphate	2463
三乙基磷酸酯 Triethyl phosphate	1109
三氟巴占 Triflubazam	2244
三异丁基磷酸酯 Triisobutyl phosphate	1483
三异丙基磷酸酯 Triisopropyl phosphate	1182
三甲基柠檬酸酯 Trimethyl citrate	1442
三甲基磷酸酯 Trimethyl phosphate	995
三辛基磷酸酯 Trioctyl phosphate	2445
甘油三油酸酯 Triolein	NO
三苯胺 Triphenylamine	2055
三苯基磷酸酯 Triphenyl phosphate	2363
三丙基磷酸酯 Tripropyl phosphate	1372
三(丁氧基乙基)磷酸酯 Tris(butoxyethyl)phosphate	2363
三(2,3-二溴丙基)磷酸酯 Tris(2,3-dibromopropyl)phosphate	NO
三(2,3-二氯丙基)磷酸酯 Tris(2,3-dichloropropyl)phosphate	2307
三(异丙基苯基)磷酸酯 Tris(isopropylphenyl)phosphate	MP
三甲苯基磷酸酯 Tritolyl phosphate	MP
三(二甲苯基)磷酸酯 Trixylenyl phosphate	MP
色胺 Tryptamine	1750
酪胺 Tyramine	1405
尿嘧啶 Uracil	NO
黄嘌呤 Xanthine	NO

①固定液为 SE-30 或 OV-1，柱温- 230℃。

②保留指数值引自 Moffat A C. J Chromatog, 1975; 113: 69。

③保留指数值引自 Thompson S F, et al. J Ass Offic Anal Chem, 1975; 58: 1037。

④商品名。

⑤表示主峰。

⑥NO 未见到色谱峰。

⑦MP 有3个以上色谱峰。

⑧农药(其部分的保留指数值是换算值)。

表 18-79　苯衍生物保留指数[196]

固定液：$C_{78}H_{158}$　　柱温：130℃

化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$	化合物	I	$10\left(\frac{\partial I}{\partial T}\right)$
2,2-二甲基己烷	719.7	0.77	2-苯乙醇	1051.5	4.83
碘苯	1078.9	6.70	苯胺	932.1	6.98
苯甲醇	973.7	4.29	环己胺	860.2	3.88

参　考　文　献

1 Wehrli A, Kovats E. Helv Chim Acta, 1959; 42: 2709
2 Andersen N H, Falcone M S. J Chromatogr, 1969: 44: 52
3 Heintz M, Druilhe A, Lefort D. Chromatographia, 1971; 4: 167
4 Hedin P A, Thompson A C, Gueldner R C. Anal Chem, 1972: 44: 1255
5 Paris C, Alexandre P. J Chrom Sci, 1972; 10: 402
6 Анингейн А А, Шульгьева Т п. Ж А Х, 1972; 27: 816
7 Caddy B, Fishand F, Scott D. Chromatographia, 1973: 6: 296
8 Gueldner R C, Hutto F Y, Thompson A C, et al. Anal Chem, 1973; 45: 376
9 Blazso M, Garzo G. Chromatographia, 1974; 7: 395
10 Moffat A C. J Chromatogr, 1975: 113: 69
11 Кириченко Э А, Марков Б А, Кочетов В А, И Др. Ж А Х, 1975; 30: 1233
12 Киреников А П, Кириченко Э А, Марков Б А. Ж А Х, 1975; 30: 345
13 Соколов Д Н, Несгеренко Г Н. Ж А Х, 1975; 30: 2381
14 ter Heide R. J Chromatogr, 1976; 129; 143
15 Menez J F, Berthou F, Picart D, et al. J Chromatogr, 1976; 129; 155
16 Michael G, Danne U, Fisher G. J Chromatogr, 1976; 118: 101
17 Miller V, Pacakova V, Smolkova E. J Chromatogr, 1976; 119: 355
18 Moller M R. Chromatographia, 1976; 9: 311
19 Onuska F I, Comba M E. J Chromatogr, 1976; 1 9: 385
20 Riedo F, Fritz D, Tarjan G, et al. J Chromatogr, 1976; 126: 63
21 Вылегжанна Г ф, Кейер Л С. Ж А Х, 1976: 31: 195
22 Кириченко Э А, Марков Б А, Кочетов В А, И Др. Ж А Х, 1976; 31: 1378
23 Donike M, Gola R, Jaenicke L. J Chromatogr, 1977; 134: 385
24 Edmonds C G, Smith A G, Brooks C J W. J Chromatogr, 1977; 133: 372
25 Kerebel A, Morfin R F, Berthon F L, et al. J Chromatogr, 1977; 140; 229
26 Petersson G. J Chrom Sci, 1977; 15; 245
27 Slemrova J, Nitsche I. J Chromatogr, 1977; 135: 401
28 Кочетов В А, Ковалов В М, Марков Б А, И Др. Ж А Х, 1978; 33: 1214
29 Donik M, Stratmann D. Z anal Chem, 1979; 279: 129
30 Huber J F K, Kenndler E, Reich G. J Chromatogr, 1979; 172: 15
31 Kupick J, Leclercq P A, Garaj J, et al. J Chromatogr, 1979; 171: 285
32 Schuetz H, Westenberger V. J Chromatogr, 1979; 169: 409
33 Stuchlik J, Pacakova V. J Chromatogr, 1979; 174: 224
34 Марков В А, Кочетов В А, Пимкин В И, И Др. Ж А Х, 1979; 34: 2040
35 Poole C F, Johanssen L, Vessman J. J Chromatogr, 1980; 194: 365
36 Poole C F, Zlatkis A. J Chromatogr, 1980; 184; 99
37 Ramsey J D, Lee T D, Osselton M D, et al. J Chromatogr, 1980; 184: 185
38 Shats V D, Belikov V A, Zelchan G I, et al. J Chromatogr, 1980; 200: 105

39 Zegota H. J Chromatogr, 1980; 192: 446
40 Ardrey R E, Maffat A C. J Chromatogr, 1981; 220: 195
41 Delbeke F T, Debackere M, Dernet N. J Chromatogr, 1981; 206; 594
42 Gandhe B R, Panday P, Sharma P K. J Chromatogr, 1981; 219: 297
43 Gill R, Tead A H, Moffat A C. J Chromatogr, 1981; 204: 275
44 Benecke R, Thieme H, Nyiredy Sz, Jr. J Chromatogr, 1982; 238: 75
45 Gajewski E, Dizdaroglu M, Simic M G. J Chromatogr, 1982; 249: 41
46 Mitra G D. J Chromatogr, 1982; 234: 214
47 Shats V D, Belikov V A, Urtane I P, et al. J Chromatogr, 1982; 237: 57
48 Stead A H, Gill R, Evans A T, et al. J Chromatogr, 1982; 234: 277
49 Winskowski J. Chromatographia, 1983; 17: 160
50 Peetre I B, Eliren O, Smith B E F. J Chromatogr, 1985; 318: 41
51 Podmaniczky L, Szepesy L, Lakszner K. Chromatographia, 1985; 20: 623
52 Evans M B, Hanken J K, Toth T. J Chromatogr, 1986; 351: 155
53 Martinez-Castro I, Paez M I, Sanz J, et al. J Chromatogr, 1986; 462: 49
54 Garcia-Raso A, Castro I M, Paez M T, et al. J Chromatogr, 1987; 398: 9
55 Paez M, Castro I M, Sanz J, et al. Chromatographia, 1987; 23: 43
56 van Gelder W M J, Jonker H H, Huizing H J, et al. J Chromatogr, 1988; 442: 133
57 Davies N W. J Chromatogr, 1990; 503: 1
58 Furr H C, Zeng S, Clifford A J, et al. J Chromatogr, 1990; 527: 406
59 顾蕙祥，阎宝石．气相色谱实用手册．第二版．北京：化学工业出版社，1990：357
60 Castello G, Vezzani S, Gerbino T C. J Chromatogr, 1991; 585: 273
61 Dutoit J C. J Chromatogr, 1991; 555: 191
62 Hanken J K, Abraham F, J Chromatogr, 1991; 550: 155
63 Garcia-Raso A, Paez M I, Martinez Castro I, et al. J Chromatogr, 1992; 607: 222
64 Reddy K S, Dutoit J C, Kovats E. J Chromatogr, 1992; 609: 229
65 Huber J F K, Kenndler E, Reich G, et al. Anal Chem, 1993; 65: 2903
66 Reddy K S, Cloux R, Kovats E. J Chromatogr A, 1994; 673: 181
67 李灵娥，关亚风，周良模．分析化学，1995；23：14

（李浩春　修振佳）

第十九章　定量校正因子数据

第一节　热导池检测器（TCD）的校正因子

表 19-1　人工煤气组分在 TCD 上的校正因子[1]

载气：H_2　　桥电流：(130～170) mA

f_i 标准气 组分	N_2	CH_4	CO_2	f_i 标准气 组分	N_2	CH_4	CO_2
O_2	1.05	0.89	—	C_2H_5	—	—	0.94
N_2	1.00	0.85	—	C_2H_4	—	—	1.00
CO	1.00	0.85	—	C_3H_8	—	-	0.71
CO_2	0.88	0.74	1.00	C_4H_8	—	—	0.74
CH_4	1.18	1.00					

表 19-2　天然气组分在 TCD 上的校正因子[2]

载气：H_2　　桥电流：(180～200) mA

化合物	f_i	化合物	f_i	化合物	f_i
氧	2.5	乙烷	1.96	异戊烷	0.98
氮	2.38	丙烷	1.55	正戊烷	0.95
二氧化碳	2.08	异丁烷	1.22		
甲烷	2.80	正丁烷	1.18		

表 19-3　液化石油气组分在 TCD 上的校正因子[3]

载气：H_2　　桥电流：200mA

化合物	f_i	化合物	f_i	化合物	f
甲烷	2.80	异丁烷	1.22	顺-2-丁烯	1.15
乙烷	1.96	正丁烷	1.18	异戊烷	0.98
乙烯	2.08	正丁烯	1.23	正戊烷	0.95
丙烷	1.55	异丁烯	1.22	1,3-丁二烯	1.25
丙烯	1.54	反-2-丁烯	1.18		

表 19-4　C_3、C_4 烃在 TCD 上的校正因子[4]

载气：H_2

化合物	f_m	s_m	化合物	f_m	s_m
丙烯	0.897	52.7	正丁烷	1.000	65.4
丙烷	0.902	55.0	反-2-丁烯	0.990	63.8
丙二烯	0.920	49.0	顺-2-丁烯	1.003	62.8
丙炔	0.939	48.0	1-丁炔	0.989	—
异丁烷	1.027	63.7	2-丁炔	0.989	—
1-丁烯	1.015	62.2	乙烯基乙炔	0.989	61.6
1,3-丁二烯	0.989	61.6	异戊烷	1.112	73.0

表 19-5 裂解 C_4 组分在 TCD 上的校正因子[5]

载气：H_2

化 合 物	s_m	f_m	化 合 物	s_m	f_m
乙烷	1.55	0.80	1-丁烯	1.05	1.01
乙烯	1.55	0.75	异丁烯	1.05	1.01
丙烷	1.19	0.90	反-2-丁烯	1.02	0.98
丙烯	1.24	0.90	顺-2-丁烯	1.04	1.00
丙二烯①	1.61	1.11	1,3-丁二烯	1.06	0.99
甲基乙炔①	1.47	1.01	异戊烷	0.90	1.11
异丁烷	1.03	1.03	正戊烷	0.84	1.04
正丁烷①	1.00	1.00			

①载气为 He。

表 19-6 C_5～C_8 烃在 TCD 上的校正因子[6]

载气：He　　基准物：苯

化 合 物	$RMR_苯$①	f_M	f_w	化 合 物	$RMR_苯$①	f_M	f_w
正戊烷	107	0.93	0.86	1,1-二甲基环己烷	127	0.79	1.13
异戊烷	101	0.99	0.92	1-顺-2-二甲基环己烷	131	0.76	1.10
新戊烷	100	1.00	0.93	1-反-2-二甲基环己烷	132	0.76	1.08
正己烷	123	0.81	0.90	1-顺-3-二甲基环己烷	134	0.75	1.07
2-甲基戊烷	120	0.83	0.92	1-反-3-二甲基环己烷	130	0.77	1.11
3-甲基戊烷	118	0.85	0.94	1-顺-4-二甲基环己烷	135	0.74	1.07
2,2-二甲基丁烷	112	0.89	0.99	1-反-4-二甲基环己烷	132	0.76	1.09
2,3-二甲基丁烷	113	0.88	0.98	乙基环己烷	133	0.75	1.08
正庚烷	138	0.72	0.93	环辛烷	130	0.77	1.11
2-甲基己烷	136	0.74	0.94	1,顺-3-戊二烯	98	1.02	0.89
3-甲基己烷	135	0.74	0.95	1,反-3-戊二烯	97	1.03	0.90
3-乙基戊烷	132	0.76	0.97	戊二烯-1,4	98	1.02	0.89
2,2-二甲基戊烷	131	0.76	0.98	3-甲基-1,2-丁二烯	100	1.00	0.87
2,3-二甲基戊烷	129	0.78	1.00	2-甲基-1,3-丁二烯	93	1.08	0.94
2,4-二甲基戊烷	129	0.78	1.00	环戊烯	91	1.10	0.96
3,3-二甲基戊烷	124	0.81	1.03	环己烯	105	0.95	1.01
2,2,3-三甲基丁烷	122	0.82	1.05	1-甲基环戊烯	109	0.92	0.97
正辛烷	153	0.65	0.96	4-甲基环己烯	116	0.86	1.06
2-甲基庚烷	152	0.66	0.96	4-乙烯基环己烯	127	0.79	1.09
3-甲基庚烷	150	0.67	0.98	环戊二烯	83	1.20	1.02
4-甲基庚烷	146	0.68	1.00	环-1,5-辛二烯	117	0.85	1.19
3-乙基己烷	145	0.69	1.00	二环戊二烯	127	0.79	1.34
2,2-二甲基己烷	145	0.69	1.00	苯	100	1.00	1.00
2,3-二甲基己烷	142	0.70	1.03	甲苯	116	0.86	1.02
2,4-二甲基己烷	145	0.69	1.01	乙基苯	130	0.77	1.05
2,5-二甲基己烷	145	0.69	1.01	邻二甲苯	128	0.78	1.06
3,3-二甲基己烷	140	0.71	1.04	间二甲苯	131	0.76	1.04
3,4-二甲基己烷	140	0.71	1.04	对二甲苯	131	0.76	1.04
2,2,4-三甲基戊烷	142	0.70	1.03	异丙苯	141	0.71	1.09
2,3,3-三甲基戊烷	132	0.76	1.11	正丙苯	145	0.69	1.06
2,3,4-三甲基戊烷	136	0.74	1.08	正丁苯	157	0.64	1.10
正壬烷	167	0.60	0.99	异丁苯	154	0.65	1.12
正癸烷	185	0.54	0.99	仲丁苯	154	0.65	1.12
环戊烷	97	1.03	0.93	叔丁苯	152	0.66	1.13
甲基环戊烷	113	0.88	0.95	邻二乙基苯	146	0.68	1.18
环己烷	110	0.91	0.98	间二乙基苯	157	0.64	1.10
甲基环己烷	119	0.84	1.05	对二乙基苯	161	0.61	1.05
1,1-二甲基环戊烷	121	0.83	1.01	对甲基异丙苯	145	0.68	1.18
1-顺-2-二甲基环戊烷	121	0.83	1.04	苯乙烯	126	0.79	1.06
1-反-2-二甲基环戊烷	121	0.83	1.04	乙腈	70	1.43	0.73
1-顺-3-二甲基环戊烷	126	0.79	1.00	噻吩	99	1.01	1.09
乙基环戊烷	124	0.81	1.02				

① $RMR_苯$——以苯为 100 的相对摩尔响应值。

表 19-7 C_5～C_8 烯烃在 TCD 上的校正因子[7]

载气：He　　基准物：苯

化 合 物	$RMR_摩$①	f_M	化 合 物	$RMR_摩$①	f_M	化 合 物	$RMR_摩$①	f_M
1-戊烯	103	0.97	顺-2-庚烯	131	0.75	3,4-二甲基-1-戊烯	124	0.81
顺-2-戊烯	102	0.98	反-2-庚烯	135	0.74	4,4-二甲基-1-戊烯	124	0.81
反-2-戊烯	104	0.96	顺-3-庚烯	136	0.74	3-乙基-2-戊烯	131	0.76
2-甲基-1-丁烯	100	1.00	反-3-庚烯	138	0.72	2,3-二甲基-2-戊烯	131	0.76
3-甲基-1-丁烯	98	1.02	2-甲基-1-己烯	132	0.76	2,4-二甲基-2-戊烯	131	0.76
2-甲基-2-丁烯	102	0.98	3-甲基-1-己烯	130	0.77	3,4-二甲基-顺-2-戊烯	128	0.78
1-己烯	119	0.84	4-甲基-1-己烯	130	0.77	3,4-二甲基-反-2-戊烯	130	0.77
顺-2-己烯	118	0.85	5-甲基-1-己烯	133	0.75	4,4-二甲基-顺-2-戊烯	126	0.79
反-2-己烯	120	0.83	2-甲基-2-己烯	134	0.75	4,4-二甲基-反-2-戊烯	129	0.78
顺-3-己烯	120	0.83	3-甲基-顺-2-己烯	132	0.76	3-甲基-2-乙基-1-丁烯	128	0.78
反-3-己烯	122	0.82	3-甲基-反-2-己烯	134	0.75	2,3,3-三甲基-1-丁烯	122	0.82
2-甲基-1-戊烯	116	0.86	4-甲基-顺-2-己烯	132	0.76	1-辛烯	151	0.66
3-甲基-1-戊烯	114	0.88	4-甲基-反-2-己烯	133	0.75	环戊烯	93	1.07
4-甲基-1-戊烯	114	0.88	5-甲基-顺-2-己烯	132	0.76	1-甲基环戊烯	109	0.92
2-甲基-2-戊烯	118	0.85	5-甲基-反-2-己烯	134	0.75	3-甲基环戊烯	108	0.93
3-甲基-顺-2-戊烯	116	0.86	2-甲基-顺-3-己烯	131	0.76	1-乙基环戊烯	125	0.80
3-甲基-反-2-戊烯	118	0.85	2-甲基-反-3-己烯	133	0.75	3-乙基环戊烯	123	0.81
4-甲基-顺-2-戊烯	116	0.86	3-甲基-顺-3-己烯	131	0.76	环己烯	105	0.95
4-甲基-反-2-戊烯	118	0.85	3-甲基-反-3-己烯	133	0.75	1-甲基环己烯	120	0.83
2-乙基-1-丁烯	115	0.87	2-乙基-1-戊烯	131	0.76	3-甲基环己烯	118	0.85
2,3-二甲基-1-丁烯	111	0.90	2-乙基-1-戊烯	131	0.76	4-甲基环己烯	117	0.85
3,3-二甲基-1-丁烯	108	0.93	2,3-二甲基-1-戊烯	126	0.79	4-乙烯基环己烯	127	0.79
2,3-二甲基-2-丁烯	116	0.86	2,4-二甲基-1-戊烯	127	0.79			
1-庚烯	135	0.74	3,3-二甲基-1-戊烯	123	0.81			

① $RMR_摩$——以苯为 100 的相对摩尔响应值。

表 19-8 炔烃等化合物在 TCD 上的校正因子[8]

载气：He　　基准物：苯

化 合 物	$RMR_摩$①	f_M	化 合 物	$RMR_摩$①	f_M	化 合 物	$RMR_摩$①	f_M
1-丁炔	83	1.20	4-甲基-2-己炔	134	0.75	3-癸炔	185	0.54
2-丁炔	89	1.12	5-甲基-1-己炔	127	0.89	4-癸炔	185	0.54
1-戊炔	100	1.00	5-甲基-2-己炔	133	0.75	5-癸炔	181	0.55
2-戊炔	106	0.94	4,4-二甲基-2-戊炔	131	0.76	2,2,5,5-四甲基-3-己炔	173	0.58
3-甲基-1-丁炔	97	1.03	1-辛炔	148	0.68	环戊基乙炔	122	0.82
1-己炔	116	0.86	2-辛炔	152	0.66	环己基乙炔	129	0.78
2-己炔	121	0.83	3-辛炔	154	0.65	1,2-丁二烯	88	1.14
3-己炔	124	0.81	4-辛炔	153	0.65	1,2-戊二烯	103	0.97
3-甲基-1-戊炔	112	0.89	6-甲基-2-庚炔	150	0.67	2,2-二甲基丁烷	113	0.88
4-甲基-1-戊炔	111	0.91	1-壬炔	163	0.61	乙基环戊烷	127	0.79
4-甲基-2-戊炔	120	0.83	2-壬炔	168	0.60	正丙基环戊烷	143	0.70
3,3-二甲基-1-丁炔	109	0.92	3-壬炔	169	0.59	正丁基环戊烷	160	0.63
1-庚炔	132	0.76	4-壬炔	170	0.59	正丙基苯	147	0.68
2-庚炔	136	0.74	7-甲基-3-辛炔	163	0.61	正丁基苯	162	0.62
3-庚炔	138	0.72	1-癸炔	179	0.56			
4-甲基-1-己炔	126	0.79	2-癸炔	185	0.54			

①以苯为 100 的相对摩尔响应值。

表 19-9　乙酸酰酯在 TCD 上的校正因子[9]

载气：He　　基准物：乙酸十六酰酯

化　合　物	s_M	s_m	f_M	f_m	化　合　物	s_M	s_m	f_M	f_m
乙酸十四酰酯	0.928	0.38	1.08	2.63	乙酸十八酰酯	1.060	0.353	0.94	2.83
乙酸十六酰酯	.000	0.341	1.00	2.94	乙酸十八烯酰酯	1.04	0.349	0.96	2.86
甘油三乙酸酯	0.920	0.422	1.09	2.37	乙酸十八二酰酯	1.01	0.340	0.99	2.94

表 19-10　胺类在 TCD 上的校正因子[1]

载气：He　　基准物：正十六胺

化　合　物	s_M	s_m	f_M	f_m	化　合　物	s_M	s_m	f_M	f_m
正辛胺	1.46	1.126	0.69	0.89	正十四胺	2.21	1.036	0.45	0.97
正癸胺	1.72	1.093	0.58	0.92	正十六胺	2.42	1.000	0.41	1.00
正十二胺	1.97	1.063	0.51	0.94	正十八胺	2.54	0.946	0.39	1.06

表 19-11　二氯甲烷中杂质在 TCD 上的校正因子[10]

载气：H_2　　桥电流：200mA

化　合　物	RWR_i	化　合　物	RWR_i	化　合　物	RWR_i
一氯甲烷	1.80	乙醛	2.03	二氯甲烷	1.24
一氯乙烷	1.42	1,1-二氯乙烯	1.18	三氯甲烷(标准物)	1.00
四氯化碳	0.84	氯丙烯	1.30		

表 19-12　三氯甲烷中杂质在 TCD 上的校正因子[11]

载气：H_2　　桥电流：200mA

化　合　物	RWR_i	化　合　物	RWR_i	化　合　物	RWR_i
乙醛	2.03	1,1-二氯甲烷	1.17	顺-1,2-二氯乙烯	1.18
反-1,2-二氯乙烯	1.18	四氯化碳	0.84	乙醇	1.83
二氯甲烷	1.24	三氯甲烷(标准物)	1.00	1,2-二氯乙烷	1.17

表 19-13　氯代苯在 TCD 上的校正因子[12]

载气：He　　基准物：苯

化　合　物	f_m	化　合　物	f_m
苯	1.00	间二氯苯	1.33
氯代苯	1.16	邻二氯苯	1.36
对二氯苯	1.26		

表 19-14　氯代芳烃在 TCD 上的校正因子[9]

载气：He　　基准物：邻氯苄基氯

化　合　物	s_M	s_m	化　合　物	s_M	s_m
邻氯甲苯	128	1.01	二氯甲基苯	104	1.55
苄基氯	169	0.75	邻氯苄基氯	161	1.00
2,4-二氯甲苯	189	0.35	对氯苄基氯	161	1.00
3,4-二氯甲苯	179	0.90			

表 19-15　溴代苯在 TCD 上的校正因子[13]

载气：He　　基准物：苯

化　合　物	f_m	化　合　物	f_m
苯	1.00	间二溴苯	1.93
溴代苯	1.54	邻二溴苯	2.00
对二溴苯	1.96		

表 19-16 部分有机化合物在 TCD 上的校正因子[16]

载气：H_2 基准物：苯

化合物	S_M	S_m	f_M	f_m	化合物	S_M	S_m	f_M	f_m
甲烷	0.357	1.73	2.80	0.58	双环戊二烯	0.76	0.78	1.32	1.28
乙烷	0.512	1.33	1.96	0.75	4-乙烯基环己烯	1.30	0.94	0.77	1.07
丙烷	0.645	1.16	1.55	0.86	环戊烯	0.80	0.92	1.25	1.09
丁烷	0.851	1.15	1.18	0.87	降冰片烯	1.13	0.94	0.89	1.06
戊烷	1.05	1.14	0.95	0.88	降冰片二烯	1.11	0.95	0.90	1.05
己烷	1.23	1.12	0.81	0.89	环庚三烯	1.04	0.88	0.96	1.14
庚烷	1.43	1.12	0.70	0.89	1,3-环辛二烯	1.27	0.91	0.79	1.10
辛烷	1.60	1.09	0.63	0.92	1,5-环辛二烯	1.31	0.95	0.76	1.05
壬烷	1.77	1.08	0.57	0.93	1,3,5,7-环辛四烯	1.14	0.86	0.88	1.16
癸烷	1.99	1.09	0.50	0.92	环十二碳三烯(反,反,反)	1.68	0.81	0.60	1.23
十一烷	1.98	0.99	0.51	1.01	环十二碳三烯	1.53	0.73	0.65	1.37
十四烷	2.34	0.92	0.42	1.09	苯	1.00	1.00	1.00	1.00
C_{20}～C_{36}		1.09	—	0.92	甲苯	1.16	0.98	0.86	1.02
异丁烷	0.82	1.10	1.22	0.91	乙基苯	1.29	0.95	0.78	1.05
异戊烷	1.02	1.10	0.98	0.91	间二甲苯	1.31	0.96	0.76	1.04
新戊烷	0.99	1.08	1.01	0.93	对二甲苯	1.31	0.96	0.76	1.04
2,2-二甲基丁烷	1.16	1.05	0.86	0.95	邻二甲苯	1.27	0.93	0.79	1.08
2,3-二甲基丁烷	1.16	1.05	0.86	0.95	异丙苯	1.42	0.92	0.70	1.09
2-甲基戊烷	1.20	1.09	0.83	0.92	正丙苯	1.45	0.95	0.69	1.05
3-甲基戊烷	1.19	1.08	0.84	0.93	1,2,4-三甲苯	1.50	0.98	0.67	1.02
2,2-二甲基戊烷	1.33	1.04	0.75	0.96	1,2,3-三甲苯	1.49	0.97	0.67	1.03
2,4-二甲基戊烷	1.29	1.01	0.78	0.99	对-乙基甲苯	1.50	0.98	0.67	1.02
2,3-二甲基戊烷	1.35	1.05	0.74	0.95	1,3,5-三甲苯	1.49	0.97	0.67	1.03
3,3-二甲基戊烷	1.33	1.04	0.75	0.96	仲丁苯	1.58	0.92	0.63	1.09
2,2,3-三甲基丁烷	1.29	1.01	0.78	0.99	联二苯	1.69	0.86	0.59	1.16
2-甲基己烷	1.36	1.06	0.74	0.94	邻三联苯	2.17	0.74	0.46	1.35
3-甲基己烷	1.33	1.04	0.75	0.96	间三联苯	2.30	0.78	0.43	1.28
3-乙基戊烷	1.31	1.02	0.76	0.98	对三联苯	2.24	0.76	0.45	1.32
2,2,4-三甲基戊烷	1.47	1.01	0.68	0.99	三苯甲烷	2.32	0.74	0.43	1.35
乙烯	0.48	1.34	2.08	0.75	萘	1.39	0.84	0.72	1.19
丙烯	0.65	1.20	1.54	0.83	四氢萘	1.45	0.86	0.69	1.16
异丁烯	0.82	1.14	1.22	0.88	1-甲基四氢萘	1.58	0.84	0.63	1.19
1-丁烯	0.81	1.13	1.23	0.88	1-乙基四氢萘	1.70	0.83	0.59	1.20
反-2-丁烯	0.85	1.19	1.18	0.84	反十氢化萘	1.50	0.85	0.67	1.18
顺-2-丁烯	0.87	1.22	1.15	0.82	顺十氢化萘	1.51	0.86	0.66	1.16
3-甲基-1-丁烯	0.99	1.10	1.01	0.91	环戊烷	0.97	1.09	1.03	0.92
2-甲基-1-丁烯	0.99	1.10	1.01	0.91	甲基环戊烷	1.15	1.07	0.87	0.93
1-戊烯	0.99	1.10	1.01	0.91	1,1-二甲基环戊烷	1.24	0.99	0.81	1.0
反-2-戊烯	1.04	1.16	0.96	0.86	乙基环戊烷	1.26	1.01	0.79	0.99
顺-2-戊烯	0.98	1.10	1.02	0.91	顺-1,2-二甲基环戊烷	1.25	1.00	0.80	1.00
2-甲基-2-戊烯	0.96	1.04	1.04	0.96	反-1,3-二甲基环戊烷	1.25	1.00	0.80	1.00
2,4,4-三甲基-1-戊烯	1.58	1.10	0.63	0.91	顺-1,3-二甲基环戊烷	1.25	1.00	0.80	1.00
丙二烯	0.53	1.03	1.89	0.97	顺-1,反-2,顺-4-三甲基环戊烷	1.36	0.95	0.74	1.05
1,3-丁二烯	0.80	1.16	1.25	0.86	顺-1,顺-2,反-4-三甲基环戊烷	1.43	1.00	0.70	1.00
环戊二烯	0.68	0.81	1.47	1.23	环己烷	1.14	1.06	0.88	0.94
2-甲基-1,3-丁二烯	0.92	1.06	1.09	0.94	甲基环己烷	1.20	0.95	0.83	1.05
1-甲基环己烯	1.15	0.93	0.87	1.07	1,1-二甲基环己烷	1.41	0.98	0.71	1.02
甲基乙炔	0.58	1.13	1.72	0.88	1,4-二甲基环己烷	1.46	1.02	0.68	0.98

续表

化合物	s_M	s_m	f_M	f_m	化合物	s_M	s_m	f_M	f_m
乙基环己烷	1.45	1.01	0.69	0.99	乙酸异戊酯	1.45	0.87	0.69	1.10
正丙基环己烷	1.58	0.98	0.63	1.02	乙酸正庚酯	1.70	0.84	0.59	1.19
1,1,3-三甲基环己烷	1.39	0.86	0.72	1.16	乙醚	1.10	1.16	0.91	0.86
氩	0.42	0.82	2.38	1.22	异丙醚	1.30	0.99	0.77	1.01
氮	0.42	1.16	2.38	0.86	正丙醚	1.31	1.00	0.76	1.00
氧	0.40	0.98	2.50	1.02	正丁醚	1.60	0.96	0.63	1.04
二氧化碳	0.48	0.85	2.08	1.18	正戊醚	1.83	0.91	0.55	1.10
一氧化碳	0.42	1.16	2.38	0.86	乙基正丁基醚	1.30	0.99	0.77	1.01
四氯化碳	1.08	0.55	0.93	1.82	2,5-己二醇	1.27	0.84	0.79	1.19
羰基铁[$Fe(CO)_5$]	1.50	0.60	0.67	1.67	1,6-己二醇	1.21	0.80	0.83	1.25
硫化氢	0.38	0.88	2.63	1.14	1,10-癸二醇	1.08	0.48	0.93	2.08
水	0.33	1.42	3.03	0.70	1,12-十二醇	1.10	0.49	0.91	2.04
丙酮	0.86	1.15	1.16	0.87	正丁胺	1.14	1.22	0.88	0.82
甲乙酮	0.98	1.05	1.02	0.95	正戊胺	1.52	1.37	0.66	0.73
二乙酮	1.10	1.00	0.91	1.00	正己胺	1.04	0.80	0.96	1.25
3-己酮	1.23	0.96	0.81	1.01	吡咯	0.86	1.00	1.16	1.00
2-己酮	1.30	1.02	0.77	0.98	二氢吡咯	0.83	0.94	1.20	1.06
3,3-二甲基-2-丁酮	1.18	0.81	0.85	1.23	四氢吡咯	0.91	1.00	1.09	1.00
甲基正戊基酮	1.33	0.91	0.75	1.10	吡啶	1.00	0.99	1.00	1.01
甲基正己基酮	1.47	0.90	0.68	1.11	1,2,5,6-四氯吡啶	1.03	0.96	0.97	1.04
环戊酮	1.06	0.99	0.94	1.01	哌啶	1.02	0.94	0.98	1.06
环己酮	1.25	0.99	0.80	1.01	丙烯腈	0.78	1.15	1.28	0.87
2-壬酮	1.61	0.93	0.62	1.07	丙腈	0.84	1.20	1.19	0.83
甲基异丁基酮	1.18	0.91	0.85	1.10	正丁腈	1.05	1.19	0.95	0.84
甲基异戊基酮	1.38	0.94	0.72	1.06	苯胺	1.14	0.95	0.88	1.05
甲醇	0.55	1.34	1.82	0.75	喹啉	1.94	1.16	0.52	0.86
乙醇	0.72	1.22	1.39	0.82	反十氢喹啉	1.17	0.66	0.85	1.51
丙醇	0.83	1.09	1.20	0.92	顺十氢喹啉	1.17	0.66	0.85	1.51
异丙醇	0.85	1.10	1.18	0.91	氨	0.40	1.86	2.5	0.54
正丁醇	0.95	1.00	1.05	1.00	环氧乙烷	0.58	1.03	1.72	0.97
异丁醇	0.96	1.02	1.04	0.98	环氧丙烷	0.80	1.07	1.25	0.93
仲丁醇	0.97	1.03	1.03	0.97	硫化氢	0.38	0.88	2.63	1.14
叔丁醇	0.96	1.02	1.04	0.98	甲硫醇	0.59	0.96	1.69	1.04
3-甲基-1-戊醇	1.07	0.98	0.93	1.02	乙硫醇	0.87	1.09	1.15	0.92
2-戊醇	1.10	0.98	0.91	1.02	1-丙硫醇	1.01	1.04	0.99	0.96
3-戊醇	1.09	0.96	0.92	1.04	四氢呋喃	0.83	0.90	1.20	1.11
2-甲基-2-丁醇	1.06	0.94	0.94	1.06	噻吩烷	1.03	0.91	0.97	1.09
正己醇	1.18	0.90	0.85	1.11	硅酸乙酯	2.08	0.79	0.48	1.27
3-己醇	1.25	0.98	0.80	1.02	乙醛	0.65	1.15	1.54	0.87
2-己醇	1.30	1.02	0.77	0.98	2-乙氧基乙醇	1.07	0.93	0.93	1.08
正庚醇	1.28	0.86	0.78	1.16	1-氟己烷	1.24	0.93	0.81	1.08
癸醇-5	1.84	0.91	0.54	1.10	1-氯丁烷	1.11	0.94	0.90	1.06
[illegible]烷-2-醇	1.98	0.84	0.51	1.19	2-氯丁烷	1.09	0.91	0.92	1.10
环戊醇	1.09	0.99	0.92	1.01	1-氯-2-甲基丙烷	1.08	0.91	0.93	1.10
环己醇	1.12	0.88	0.89	1.14	2-氯-2-甲基丙烷	1.04	0.88	0.96	1.14
乙酸乙酯	1.11	0.99	0.90	1.01	1-氯戊烷	1.23	0.91	0.81	1.10
乙酸乙丙酯	1.21	0.93	0.83	1.08	1-氯己烷	1.34	0.87	0.75	1.14
乙酸正丁酯	1.35	0.91	0.74	1.10	1-氯庚烷	1.47	0.86	0.68	1.16
乙酸正戊酯	1.46	0.88	0.68	1.14	溴代乙烷	0.98	0.70	1.02	1.43

续表

化合物	s_M	s_m	f_M	f_m	化合物	s_M	s_m	f_M	f_m
1-溴丙烷	1.08	0.68	0.93	1.47	1,2-二溴乙烷	1.17	0.48	0.85	2.08
2-溴丙烷	1.07	0.68	0.93	1.47	1-溴-2-氯乙烷	1.10	0.59	0.91	1.69
1-溴丁烷	1.19	0.68	0.84	1.47	1,1-二氯乙烷	1.03	0.81	0.97	1.23
2-溴丁烷	1.16	0.66	0.86	1.52	1,2-二氯丙烷	1.12	0.77	0.89	1.30
1-溴-2-甲基丙烷	1.15	0.66	0.87	1.52	顺-1,2-二氯乙烯	1.00	0.81	1.00	1.23
1-溴戊烷	1.28	0.66	0.78	1.52	2,3-二氯丙烯	1.10	0.77	0.91	1.30
碘代甲烷	0.96	0.53	1.04	1.89	三氯乙烯	1.15	0.69	0.87	1.45
碘代乙烷	1.06	0.53	0.94	1.89	氟代苯	1.05	0.85	0.95	1.18
1-碘丙烷	1.17	0.54	0.85	1.85	间二氟代苯	1.07	0.73	0.93	1.37
1-碘丁烷	1.29	0.55	0.78	1.82	邻氟代甲苯	1.16	0.83	0.86	1.20
2-碘丁烷	1.23	0.52	0.81	1.92	对氟代甲苯	1.17	0.83	0.85	1.20
1-碘-2-甲基丙烷	1.22	0.52	0.82	1.92	间氟代甲苯	1.18	0.84	0.85	1.19
1-碘戊烷	1.38	0.55	0.73	1.82	1-氯-3-氟代苯	1.19	0.72	0.84	1.38
二氯甲烷	0.94	0.87	1.06	1.14	间溴 α,α,α 三氟代甲苯	1.45	0.52	0.68	1.92
氯仿	1.08	0.71	0.93	1.41	氯代苯	1.16	0.80	0.86	1.25
四氯化碳	1.20	0.61	0.83	1.64	邻氯代甲苯	1.28	0.79	0.78	1.27
二溴甲烷	1.07	0.48	0.93	2.08	氯代环己烷	1.20	0.79	0.83	1.27
溴氯甲烷	1.00	0.61	1.00	1.64	溴代苯	1.24	0.62	0.81	1.61

表 19-17 部分有机化合物在 TCD 上的摩尔响应值[15]

载气：H_2　　基准物：苯

化合物	$RMR_ϕ$	化合物	$RMR_ϕ$	化合物	$RMR_ϕ$	化合物	$RMR_ϕ$
正戊烷	102	正壬烷	185	丙酮	89	三氯乙烷	99
正己烷	123	苯	100	甲醇	59	四氯化碳	112
正庚烷	132	环己烷	105	乙醇	69	二硫化碳	84
正辛烷	152	二乙醚	101	二氯甲烷	87	甲苯	116

第二节　氢火焰离子化检测器(FID)的校正因子

表 19-18 脂肪醇在 FID 上的校正因子[16]

化合物[①]	f_m	化合物[①]	f_m	化合物[①]	f_m	化合物[①]	f_m	化合物[①]	f_m
n-C_4醇	0.56	n-C_8醇	0.65	n-C_{14}烷	0.73	i^0-C_{15}醇	0.76	i^*-C_{18}醇	0.75
n-C_7烷	0.80	n-C_{11}烷	0.75	i^0-C_{12}醇	0.80	i^*-C_{15}醇	0.76	n-C_{18}醇	0.75
n-C_5醇	0.56	i^0-C_9醇	0.70	i^*-C_{12}醇	0.80	n-C_{15}醇	0.76	n-C_{21}烷	0.75
n-C_8烷	0.83	i^*-C_9醇	0.70	n-C_{12}醇	0.80	n-C_{18}烷	0.82	n-C_{19}醇	0.77
i^0-C_6醇	0.56	n-C_9醇	0.70	n-C_{15}烷	0.78	i^0-C_{16}醇	0.65	n-C_{22}烷	0.62
n-C_6醇	0.56	n-C_{12}烷	0.63	i^0-C_{13}醇	0.81	i^*-C_{16}醇	0.65	n-C_{20}醇	0.79
n-C_9烷	0.88	i^0-C_{10}醇	0.65	i^*-C_{13}醇	0.81	n-C_{16}醇	0.65	n-C_{23}烷	0.69
i^0-C_7醇	0.56	i^*-C_{10}醇	0.65	n-C_{13}醇	0.81	n-C_{19}烷	0.82	n-C_{21}醇	0.81
i^*-C_7醇	0.56	n-C_{10}醇	0.65	n-C_{16}烷	0.75	i^0-C_{17}醇	0.70	n-C_{24}烷	0.76
n-C_7醇	0.56	n-C_{13}烷	0.81	i^0-C_{14}醇	0.81	i^*-C_{17}醇	0.70	n-C_{22}醇	0.83
n-C_{10}烷	0.75	i^0-C_{11}醇	0.69	i^*-C_{14}醇	0.81	n-C_{17}醇	0.70	n-C_{25}烷	0.80
i^0-C_8醇	0.65	i^*-C_{11}醇	0.69	n-C_{14}醇	0.81	n-C_{20}烷	0.80	n-C_{23}醇	0.85
i^*-C_8醇	0.65	n-C_{11}醇	0.69	n-C_{17}烷	0.85	i^0-C_{18}醇	0.75	n-C_{24}醇	0.83

① i^0-醇为 $R-C(OH)(CH_3)-C(CH_3)(CH_3)-CH_3$；$i^*$-醇为 $R-C(OH)(C_2H_5)-C_3H_7$。

表 19-19　酚类在 FID 上的校正因子[17]

化　合　物	f_m	化　合　物	f_m	化　合　物	f_m	化　合　物	f_m
苯	0.89	邻乙酚	1.59	2,5-二甲酚	1.47	对-2-丙酚	1.43
苯酚	1.64	间乙酚	1.64	2,6-二甲酚	1.47	对异丙酚	1.79
邻甲酚	1.52	对乙酚	1.67	3,5-二甲酚	1.45	2,3,5-三甲酚	1.67
间甲酚	1.67	2,3-二甲酚	1.61	3,4-二甲酚	1.64	2,4,6-三甲酚	1.61
对甲酚	1.67	2,4-二甲酚	1.67	2-异丙酚	1.56	2,3,5,6-四甲酚	2.13

表 19-20　酯类在 FID 上的校正因子[18]

化　合　物	f_m	化　合　物	f_m	化　合　物	f_m	化　合　物	f_m
乙酸乙酯	0.91	戊酸乙酯	1.56	辛酸乙酯	1.45	十六酸乙酯	1.00
丙酸乙酯	1.54	异戊醇	0.87	苯乙酸乙酯	1.16	油酸乙酯	1.97
丁酸乙酯	1.49	己酸乙酯	1.23	苯乙醇	1.00	亚油酸乙酯	1.04
异丁醇	1.56	庚酸乙酯	1.45	十二酸乙酯	1.20		

表 19-21　苯酐甲酯化杂质在 FID 上的校正因子[19]

化　合　物	f_m	化　合　物	f_m	化　合　物	f_m
邻二甲苯	0.48	苯甲酸甲酯	0.60	苯氧基乙酸甲酯	1.00
顺丁烯二酸二甲酯	1.65	邻甲苯甲酸甲酯	0.54	苯酚	0.88
顺甲基丁烯二酸二甲酯	0.95	萘	0.42		

表 19-22　有机酸（氯甲酸乙酯衍生物）在 FID 上的摩尔响应值[20]

化　合　物	RWR	cv/% (n=6)	化　合　物	RWR	cv/% (n=6)	化　合　物	RWR	cv/% (n=6)
3-羟基丁酸	0.34	8.8	3-甲基己二酸	0.19	6.8	半胱氨酸	0.23	9.8
2-氧代异戊酸	0.40	8.0	3-羟基乙酸	0.17	9.6	十八碳酸	1.57	4.9
2-氧代甲基戊酸或2-氧代异己酸	1.08	8.3	亮氨酸	0.70	5.3	油酸	1.55	5.2
丙二酸	0.45	5.4	异亮氨酸	0.40	7.2	十八碳二烯-9,12-酸	1.54	4.3
甲基丙二酸	0.46	6.6	十二碳酸	1.01	5.5	十八碳三烯-9,12,15-酸	1.52	6.2
乙基丙二酸	0.54	7.5	苏氨酸	0.34	4.4	对氯苯丙氨酸(基准物)	1.00	
2-羟基乙酸	0.25	8.1	丝氨酸	0.26	4.6	谷氨酰胺	0.24	10.3
2-羟基丙酸	0.38	8.1	谷氨酸	0.10	12.4	鸟氨酸	0.67	3.3
2-羟基丁酸	0.48	7.9	脯氨酸	0.49	5.3	二十碳酸	1.62	4.1
丙氨酸	0.46	4.6	天冬酰胺	0.38	4.7	花生四烯酸	1.60	3.7
2-羟基异戊酸	0.35	9.0	羟基丁二酸	0.11	9.0	赖氨酸	0.75	3.7
甘氨酸	0.37	5.1	十四碳酸	1.17	3.7	二十二碳六烯酸	0.37	7.8
3-甲基戊二酸	0.27	9.7	蛋氨酸	0.63	3.3	酪氨酸	1.67	3.6
2-氨基丁酸	0.49	4.1	4-羟基脯氨酸	0.39	5.6	二十四碳烯酸	0.84	3.1
2-羟基异戊酸	0.60	5.5	十六碳酸	1.37	5.4	色氨酸	1.70	5.4
己二酸	0.51	6.7	十六烯-9-酸	1.35	5.2	半胱氨酸	1.08	3.7
缬氨酸	0.52	5.0	苯丙氨酸	1.02	2.9			

表 19-23　羟基羧酸（TBDMS 衍生物）在 FID 上的相对摩尔响应值[21]

化　合　物	RMR	cv/% (n=3)	化　合　物	RMR	cv/% (n=3)
乳酸	0.538	1.1	3-羟基壬酸	1.364	1.7
2-羟基-4-丁酸	0.457	1.5	2-羟基癸酸	1.336	1.1
2-羟基异戊酸	0.844	1.2	3-羟基-4-甲基癸酸①	0.671	1.5
2-羟基异己酸	0.643	1.9	3-羟基-4-甲基癸酸①	0.698	1.4
4-羟基丁酸	0.775	2.1	3-羟基十一酸	1.537	0.8
2-羟基-3-甲基戊酸	0.793	1.4	3-羟基十二酸	1.613	1.0
2-羟基己酸	0.914	1.3	正亮氨酸(基准物)	1.000	—
2-羟基辛酸	1.154	1.8			

① 合成产物的未知立体异构体。

表 19-24 蒽醌染料与中间体在 FID 上的校正因子[22]

化合物	f_m	化合物	f_m	化合物	f_m
C_{20}～C_{36}烷烃	1.00	1,4-二氨基蒽醌	1.50	1,4,5,8-四氯蒽醌	2.12
蒽醌	1.50	1-氯蒽醌	1.39	1-三甲基甲硅氧基蒽醌	1.61
1-氨基蒽醌	1.64	1,5-二氯蒽醌	1.54	1,2,4-三(三甲基甲硅氧基)蒽醌	2.70

表 19-25 硝基甲苯在 FID 上的校正因子[23]

化合物	s_M	f_m	化合物	s_M	f_m	化合物	s_M	f_m
甲苯	1.475	0.275	2,4-二硝基甲苯	1.055	0.76	2,3,5-三硝基甲苯	0.885	0.13
邻硝基甲苯	1.313	0.46	2,3-二硝基甲苯	1.215	0.66	2,4,5-三硝基甲苯	0.893	1.12
间硝基甲苯	1.342	0.45	3,5-二硝基甲苯	1.129	0.71	2,3,4-三硝基甲苯	0.971	1.03
对硝基甲苯	1.285	0.47	3,4-二硝基甲苯	1.114	0.72	1,3,5-三硝基苯	0.795	1.17
2,6-二硝基甲苯	1.111	0.72	2,4,6-三硝基甲苯	1.000	1.00		0.614①	1.52①
2,5-二硝基甲苯	1.114	0.72	2,3,6-三硝基甲苯	1.010	0.09			

①有大量2,4,6-三硝基甲苯共存时的结果(用于测定三硝基苯的实际样品)。

表 19-26 氟烷在 FID 上的相对质量响应值[24]

基准物：C_7H_{16}，$s(C_7H_{16})=1.00$

化合物	s_m
CF_4	0.0000034
C_2F_6	0.000300
C_4F_{10}	0.0870
C_5F_{12}	0.301
C_6F_{14}	0.621
C_7F_{16}	1.00
C_8F_{18}	1.20

表 19-27 氯代苯在 FID 上的校正因子[25]

化合物	f_m
苯	1.000
氯代苯	1.165
1,3,5-三氯苯	1.456
1,2,4-三氯苯	1.484
1,2,3-三氯苯	1.565

表 19-28 卤代苯在 FID 上的校正因子（一）[26]

化合物	f_m
苯	1.000
1-氯-4-氟苯	1.340
1-氯-3-氟苯	1.341
氯代苯	1.186
1-氯-2-氟苯	1.354

表 19-29 卤代苯在 FID 上的校正因子（二）[27]

化合物	f_m
苯	1.00
氯代苯	1.06
1-溴-4-氯苯	1.46
1-溴-3-氯苯	1.44
1-溴-2-氯苯	1.62

表 19-30 多氯联苯在 FID 上的校正因子[28]

多氯联苯	f_m①	标准偏差	多氯联苯	f_m①	标准偏差	多氯联苯	f_m①	标准偏差
3	1.14	0.07	3,3'-	1.33	0.01	2,5,2',5'-	1.59	0.04
2,2'-	1.26	0.01	3,4'-	1.30	0.01	2,4,2',5'-	1.61	0.05
2,3'	1.49	0.06	2,5,2'-	1.32	0.04	2,3,2',3'-	1.61	0.05
2,5	1.33	0.0	3,5,3'-	1.42	0.05	2,3,2',5'-	1.59	0.04
2,4'	1.27	0.0.	2,5,1'-	1.40	0.04	2,5,3',4'-	1.61	0.05
2,6	1.18	0.06	2,4,4'-	1.82	0.05	3,4,3',4'-	1.84	0.02
4,4'-	1.26	0.03	2,3,4'	1.45	0.04	2,3,4,2',5'-	1.85	0.02
2,4	1.24	0.06	2,6,2',6'-	1.52	0.05			
3,5	1.22	0.06	2,4,2',4'-	1.57	0.05			

①蒽为基准物(f_R=1.00)。

表 19-31 二聚与三聚甘油（TMS 衍生物）在 FID 上的校正因子[29]

化合物	f_m
二聚甘油	1.10
三聚甘油	1.00
α-甲基葡萄糖苷(基准物)	1.00

表 19-32 甘油三酸酯在 FID 上的校正因子[30]

化合物	f_m
甘油三辛酸酯	1.07
甘油三癸酸酯	1.02
甘油月桂酸酯	0.98
甘油十四烷酸酯	0.99
甘油棕榈酸酯	1.04
甘油硬脂酸酯	1.12

表 19-33 氨基醇（TBDMS 衍生物）在 FID 上的相对摩尔响应值[31]

化合物	RMR①	cv/% (n=3)	化合物	RMR①	cv/% (n=3)	化合物	RMR①	cv/% (n=3)
2-氨基丙醇	0.455	1.6	亮氨醇	0.641	2.2	苯基丙氨醇	0.790	2.0
2-氨基丁醇	0.585	1.3	2-氨基己醇	0.617	1.6	正亮氨酸(基准物)	1.000	—
缬氨醇	0.636	1.7	苯基甘氨醇	0.882	2.1			
2-氨基戊醇	0.589	2.1	丝氨醇	0.425	2.3			

①RMR——同系物的相对摩尔响应值。

表 19-34 氨基酸（TBDMS 衍生物）在 FID 上的相对摩尔响应值（一）[32]

化合物	RMR①	S (n−4)	化合物	RMR①	S (n=4)	化合物	RMR①	S (n=4)
丙氨酸	1.18	0.03	吡咯型谷氨酸	0.38	0.01	谷氨酰胺 I	0.23	0.0[illegible]
甘氨酸	1.06	0.03	蛋氨酸	0.80	0.02	DL-α-氨基甘椒酸+爪氨酸 I	0.93	0.04
正磷酸-L-丝氨酸	0.47	0.02	ε-氨基正己酸	0.78	0.02	精氨酸 I	0.65	0.02
L-α-氨基正丁酸	1.18	0.05	丝氨酸	1.49	0.05	组氨酸	0.85	0.04
脲	0.57	0.01	苏氨酸	1.51	0.06	肌肽	0.33	0.0[illegible]
β-丙氨酸	1.21	0.05	苯丙氨酸	1.46	0.04	酪氨酸	0.90	0.0[illegible]
DL-β-氨基异丁酸	0.94	0.01	天冬氨酸	1.40	0.05	δ-羟素	0.37	0.02
缬氨酸	1.32	0.01	羟基脯氨酸	1.21	0.02	DL α,ε 二氨基庚二酸	1.20	0.04
L-正缬氨酸	1.28	0.02	光胱氨酸	0.84	0.02	色氨酸 I	0.92	0.03
亮氨酸	1.44	0.02	3-甲基-L-组氨酸	0.89	0.04	羊毛硫氨酸	0.30	0.01
异亮氨酸	1.34	0.02	谷氨酸	0.85	0.03	3-(3,4-二羟基苯基) DL-丙氨酸	1.35	0.02
L-正亮氨酸	1.49	0.09	精氨酸 1+鸟氨酸-爪氨酸 1	1.59	0.07	丙氨酸丁氨酸硫醚	1.02	0.02
γ-氨基正丁酸	0.63	0.02	天冬酰胺	0.71	0.03	胱氨酸	0.98	0.05
脯氨酸	1.01	0.01	1-甲基-L-组氨酸	0.32	0.02	高胱氨酸	0.80	0.02
肌氨酸	0.58	0.01	L-α-氨基己二酸	1.05	0.05			
正磷酸基乙醇胺	0.51	0.01	赖氨酸	1.04	0.04			
肌酸酐	0.92	0.01						

①基准物为十八碳烷(RMR=1)。

表 19-35 氨基酸（TBDMS 衍生物）在 FID 上的相对摩尔响应值（二）[31]

化合物	RMR	cv/% (n=6)	化合物	RMR	cv/% (n=6)	化合物	RMR	cv/% (n=6)
丙氨酸	0.810	2.1	脯氨酸	0.917	2.5	4-羟基脯氨酸	1.033	0.9
甘氨酸	0.652	3.2	N-甲基缬氨酸	0.672	1.9		0.857	1.3
2-氨基异丁酸	0.553	2.5	N-甲基亮氨酸	0.581	2.4	N-甲基苯丙氨酸	0.879	2.1
2-氨基丁酸	1.071	2.4	哌可酸	0.887	2.1	半胱氨酸	0.436	5.4
β-丙氨酸	0.855	1.9	N-甲基异亮氨酸	0.776	1.9	谷氨酸	0.721	2.8
N-甲基丙氨酸	0.552	1.9	2-氨基辛酸	0.648	4.0	鸟氨酸	0.724	2.5
缬氨酸	0.745	2.7	蛋氨酸	0.972	1.1	赖氨酸	0.721	4.4
正缬氨酸	1.004	2.8	丝氨酸	0.890	2.9	精氨酸	0.378	4.3
异缬氨酸	0.947	1.1	苏氨酸	1.074	1.9	组氨酸	0.413	8.0
亮氨酸	0.800	2.2	别-苏氨酸	0.953	2.2	酪氨酸	1.152	1.8
别-异亮氨酸	0.972	0.9	苯丙氨酸	1.004	3.3	色氨酸	1.021	1.7
异亮氨酸	0.951	2.2	天冬氨酸	0.995	3.3	正亮氨酸(基准物)	1.000	—

表 19-36　白酒组分在 FID 上的校正因子 (一)[33]

化　合　物	f_m	化　合　物	f_m	化　合　物	f_m	化　合　物	f_m
乙醇	1.65	正丙醇	1.05	正丁醇	0.87	乳酸乙酯	1.70
甲醇	1.62	乙酸特丁酯	1.04	丁酸乙酯	1.04	己酸正戊酯	1.07
甲酸乙酯	1.74	仲丁醇	0.93	乙酸正丁酯(基准物)	1.00	糠醛	0.65
异丙醇	0.96	乙缩醛	1.19	异戊醇	0.81	正己醇	0.77
乙酸乙酯	1.49	丙酸乙酯	0.99	醋翁	3.06	己酸乙酯	1.02
丙酸甲酯	1.51	异丁醇	0.89	正戊醇	0.88	庚酸乙酯	1.01
双乙酰	0.88	异丁酸乙酯	1.19	戊酸乙酯	0.96		

表 19-37　白酒组分在 FID 上的校正因子 (二)[34]

化　合　物	f_m	化　合　物	f_m	化　合　物	f_m	化　合　物	f_m
乙醛	1.81	乙缩醛	1.30	乳酸乙酯	1.72	戊酸乙酯	1.01
甲醇	1.45	异丁醇	0.68	糠醛	1.20	乙酸正丁酯(基准物)	1.00
乙酸乙酯	1.40	正丁醇	0.73	己酸乙酯	0.90		
正丙醇	0.85	乙酸乙酯	1.10	正己醇	0.70		
仲丁醇	0.81	异戊醇	0.81	乙酸异戊酯	0.83		

表 19-38　白酒组分在 FID 上的校正因子 (三)[33]

化　合　物	f_m	化　合　物	f_m	化　合　物	f_m	化　合　物	f_m
丙酸乙酯	1.15	第二己醇	1.11	乙酰乙酸乙酯	2.40	苯乙酸乙酯	1.45
异丁酸乙酯	1.02	丁酸丁酯	1.10	壬酸乙酯	1.05	月桂酸乙酯	1.01
乙酸丙酯	1.39	丁酸戊酯	1.01	辛醇	0.98	β-苯乙醇	0.94
乙酸异丁酯	1.17	乙酸正己酯	1.51	乳酸异戊酯	2.53	月桂醇	1.00
异戊酸乙酯	1.03	环戊醇	1.01	2,3-丁二醇	2.56	肉豆蔻酸乙酯	1.10
叔戊醇	1.11	戊酸丁酯	1.23	丁二酸二甲酯	2.29	肉豆蔻醇	1.40
叔己醇	0.93	异己醇	0.96	癸酸乙酯	1.13	棕榈酸乙酯	1.03
戊醇 3	1.23	乙酸正庚酯(基准物)	1.00	苯甲酸乙酯	0.92	肉桂醇	1.78
乙酸异戊酯	1.04	环己醇	1.03	糠醇	1.50	十八酸乙酯	1.18
丁酸丙酯	1.28	辛酸乙酯	1.02	壬醇	1.63	油酸乙酯	1.29
乙酸正戊酯	1.30	己酯异戊酯	1.23	壬二酸乙二酯	2.02	亚油酸乙酯	1.27
丙酸异戊酯	1.12	庚醇	0.87	癸醇	1.76		

表 19-39　白酒组分在 FID 上的校正因子 (四)[34]

化　合　物	f_m	化　合　物	f_m	化　合　物	f_m	化　合　物	f_m
乙酸乙酯	1.58	糠醛	1.45	第三戊醇	1.54	庚酸乙酯	0.90
异丁醇	1.00	己酸乙酯	0.90	第二戊醇	1.13	乙酸正戊酯(基准物)	1.00
正丁醇	1.14	正己醇	0.95	正戊醇	1.10		
异戊醇	0.92	乙酸异戊酯	1.03	辛醇	0.94		
乳酸乙酯	2.27	叔丁醇	0.95	庚醇	0.92		

表 19-40　白酒组分在 FID 上的校正因子 (五)[34]

化　合　物	f_m①	化　合　物	f_m①	化　合　物	f_m①	化　合　物	f_m①
辛酸乙酯	1.010	乳酸异戊酯	1.900	癸醇	1.030	肉豆蔻酸乙酯	1.075
庚醇	1.050	2,3-丁二醇	2.300	β-乙酸苯乙酯	1.010	肉豆蔻醇	1.200
糠醛	2.000	癸酸乙酯	1.010	月桂酸乙酯	1.010	棕榈酸乙酯	1.136
辛醇	1.030	糠醇	4.600	β-苯乙醇	1.100	油酸乙酯	1.136
壬酸乙酯	1.010	丁二酸二乙酯	1.950	月桂醇	1.800	亚油酸乙酯	1.136

①基准物为乙酸庚酯(f_m=1.000)。

表 19-41　白酒中有机酸（甲酯衍生物）在 FID 上的校正因子（一）[35]

化合物	f_m	化合物	f_m	化合物	f_m	化合物	f_m
甲酸	0.82	异丁酸	0.87	α-乙基丁酸(基准物)	1.00	己酸	1.05
乙酸	0.68	丁酸	0.80	戊酸	0.95		
丙酸	0.79	异戊酸	1.04	乳酸	1.80		

表 19-42　白酒中有机酸（甲酯衍生物）在 FID 上的校正因子（二）[35]

化合物	f_m	化合物	f_m	化合物	f_m	化合物	f_m
庚酸	1.004	苯甲酸	1.092	肉豆蔻酸	1.668	亚油酸	2.700
辛酸	1.234	苯乙酸(基准物)	1.00	棕榈酸	1.882		
壬酸	1.179	月桂酸	1.349	十八酸	2.170		
癸酸	1.154	阿魏酸	1.819	油酸	2.752		

表 19-43　脂肪酸（苄酯衍生物）在 FID 上的校正因子[33]

化合物	f_m	化合物	f_m	化合物	f_m	化合物	f_m
甲酸	0.76	异丁酸	0.85	戊酸	1.13	辛酸	1.14
乙酸	0.75	丁酸	0.84	己酸	0.92	乳酸	1.70
丙酸	0.85	异戊酸	0.96	庚酸	1.10		

表 19-44　C_6～C_{18}脂肪酸（甲酯衍生物）在 FID 上的校正因子[34]

化合物	f_m	化合物	f_m	化合物	f_m	化合物	f_m
己酸	1.18	癸酸	1.04	十四烷酸	1.00	十八烷酸	0.91
庚酸	1.05	丁二酸	1.05	十五烷酸	1.00	油酸	0.94
辛酸	1.14	十二烷酸	1.02	十六烷酸	0.95	亚油酸	1.01
壬酸	1.05	十三烷酸	1.04	十六烯酸	1.08		

表 19-45　酮与醛（2,4-二硝基苯腙衍生物）在 FID 上的校正因子[34]

化合物	f_m	化合物	f_m	化合物	f_m	化合物	f_m
蒽	1.00	丁酮	2.93	丁烯醛	4.01	庚酮	3.82
甲醛	3.51	丁醛	4.21	戊醛	4.41	糠醛	5.03
乙醛	3.06	丁二酮	5.18	甲基异戊醛	2.93	庚醛	6.99
丙酮	2.25	戊酮	3.55	α-甲基戊醛	2.45	辛醛	4.86
丙醛	4.64	异丁醛	3.06	α-己酮	3.74	苯甲醛	2.66
丙烯醛	5.14	异戊醛	2.54	己醛	4.03		

表 19-46　芳烃衍生物在 FID 上的校正因子[7]

化合物	f_m	化合物	f_m
甲苯	0.77	氯化苄	1.00
邻氯甲苯	0.94	2,4-二氯甲苯	1.17
间氯甲苯	0.94	亚苄基二氯	1.36
苯甲醛	1.15		

表 19-47　部分有机化合物在 FID 上的校正因子[5]

基准物：苯

化合物	s_m	f_m	化合物	s_m	f_m	化合物	s_m	f_m
甲烷	0.87	1.15	戊烷	0.93	1.08	壬烷	0.88	1.14
乙烷	0.87	1.15	己烷	0.92	1.09	异戊烷	0.94	1.06
丙烷	0.87	1.15	庚烷	0.89	1.12	2,2-二甲基丁烷	0.93	1.08
丁烷	0.92	1.09	辛烷	0.87	1.15	2,3-二甲基丁烷	0.92	1.09

续表

化合物	s_m	f_m	化合物	s_m	f_m	化合物	s_m	f_m
2-甲基戊烷	0.94	1.06	1-甲基-反-3-乙基环戊烷	0.87	1.15	仲丁醇	0.56	1.79
3-甲基戊烷	0.93	1.08	1-甲基-顺-3-乙基环戊烷	0.89	1.12	叔丁醇	0.66	1.52
2-甲基己烷	0.91	1.10	1,1,2-三甲基环戊烷	0.92	1.09	戊醇	0.63	1.59
3-甲基己烷	0.91	1.10	1,1,3-三甲基环戊烷	0.93	1.08	1,3-二甲基丁醇	0.66	1.52
2,2-二甲基戊烷	0.91	1.10	反-1,2-顺-3-三甲基环戊烷	0.90	1.11	甲基戊醇	0.58	1.72
2,3-二甲基戊烷	0.88	1.14	反-1,2-顺-4-三甲基环戊烷	0.88	1.12	己醇	0.66	1.52
2,4-二甲基戊烷	0.91	1.10	顺-1,2-反-3-三甲基环戊烷	0.88	1.12	辛醇	0.76	1.32
3,3-二甲基戊烷	0.92	1.09	顺-1,2-反-4-三甲基环戊烷	0.88	1.12	癸醇	0.75	1.33
3-乙基戊烷	0.91	1.10	异丙基环戊烷	0.88	1.12	丁醛	0.55	1.82
2,2,3-三甲基丁烷	0.91	1.10	正丙基环戊烷	0.87	1.15	庚醛	0.69	1.45
2-甲基庚烷	0.87	1.15	环己烷	0.90	1.11	辛醛	0.70	1.43
3-甲基庚烷	0.90	1.11	甲基环己烷	0.90	1.11	癸醛	0.72	1.40
4-甲基庚烷	0.91	1.10	乙基环己烷	0.90	1.11	丙酮	0.44	2.27
2,2-二甲基己烷	0.90	1.11	1-甲基-反-4-甲基环己烷	0.88	1.14	甲乙酮	0.54	1.85
2,3-二甲基己烷	0.88	1.14	1-甲基-顺-4-乙基环己烷	0.86	1.16	甲基异丁基酮	0.63	1.59
2,4-二甲基己烷	0.88	1.14	1,1,2-三甲基环己烷	0.90	1.11	乙基丁基酮	0.63	1.59
2,5-二甲基己烷	0.90	1.11	异丙基环己烷	0.88	1.14	二异丁基酮	0.64	1.56
3,4-二甲基己烷	0.88	1.14	环庚烷	0.90	1.11	乙基戊基酮	0.72	1.39
3-乙基己烷	0.89	1.12	苯	1.00	1.00	环己烷	0.64	1.56
2-甲基-3-乙基戊烷	0.88	1.14	甲苯	0.96	1.04	甲酸	0.009	111.11
2,2,3-三甲基戊烷	0.91	1.10	乙基苯	0.92	1.09	乙酸	0.21	4.76
2,2,4-三甲基戊烷	0.89	1.12	对二甲苯	0.89	1.12	丙酸	0.36	2.78
2,3,3-三甲基戊烷	0.90	1.11	间二甲苯	0.93	1.08	丁酸	0.43	2.33
2,3,4-三甲基戊烷	0.88	1.14	邻二甲苯	0.91	1.10	己酸	0.56	1.79
2,2-二甲基庚烷	0.87	1.15	1-甲基-2-乙基苯	0.91	1.10	庚酸	0.54	1.85
3,3-二甲基庚烷	0.89	1.12	1-甲基-3-乙基苯	0.90	1.11	辛酸	0.58	1.72
2,4-二甲基-3-乙基戊烷	0.88	1.14	1-甲基-4-乙基苯	0.89	1.12	乙酸甲酯	0.18	5.56
2,2,3-三甲基己烷	0.90	1.11	1,2,3-三甲苯	0.88	1.14	乙酸乙酯	0.34	2.94
2,2,4-三甲基己烷	0.88	1.14	1,2,4-三甲苯	0.87	1.15	乙酸异丙酯	0.44	2.27
2,2,5-三甲基己烷	0.88	1.14	1,3,5-三甲苯	0.88	1.14	乙酸仲丁酯	0.46	2.17
2,3,3-三甲基己烷	0.89	1.12	异丙苯	0.87	1.15	乙酸异丁酯	0.48	2.08
2,3,5-三甲基己烷	0.86	1.16	正丙苯	0.90	1.11	乙酸丁酯	0.49	2.04
2,4,4-三甲基己烷	0.90	1.11	1-甲基-2-异丙苯	0.88	1.14	乙酸异戊酯	0.55	1.82
2,2,3,3-四甲基戊烷	0.89	1.12	1-甲基-3-异丙苯	0.90	1.11	乙酸甲基异戊酯	0.56	1.79
2,2,3,4-四甲基戊烷	0.88	1.14	1-甲基-4-异丙苯	0.88	1.14	己酸乙基(2)乙酯	0.64	1.56
2,3,3,4-四甲基戊烷	0.88	1.14	仲丁苯	0.89	1.12	乙酸2-乙氧基乙醇酯	0.45	2.22
3,3,5-三甲基庚烷	0.88	1.14	叔丁苯	0.91	1.10	己酸己酯	0.70	1.42
2,2,3,4-四甲基己烷	0.90	1.11	正丁苯	0.88	1.14	乙腈	0.35	2.86
2,2,4,5-四甲基戊烷	0.89	1.12	乙炔	0.96	1.04	三甲基胺	0.41	2.44
环戊烷	0.93	1.08	乙烯	0.91	1.10	叔丁基胺	0.48	2.08
甲基环戊烷	0.90	1.11	1-己烯	0.88	1.14	二乙基胺	0.54	1.85
乙基环戊烷	0.89	1.12	1-辛烯	1.03	0.97	苯胺	0.67	1.49
1,1-二甲基环戊烷	0.92	1.09	1-癸烯	1.01	0.99	二正丁基胺	0.67	1.49
反-1,2-二甲基环戊烷	0.90	1.11	甲醇	0.21	4.76	2-乙氧基乙醇	0.40	2.50
顺-1,2-二甲基环戊烷	0.89	1.12	乙醇	0.41	2.43	2-丁氧基乙醇	0.55	1.82
反-1,3-二甲基环戊烷	0.89	1.12	正丙醇	0.54	1.85	异佛尔酮	0.76	1.32
顺-1,3-二甲基环戊烷	0.89	1.12	异丙醇	0.47	2.13	噻吩烷	0.51	1.96
1-甲基-反-2-乙基环戊烷	0.90	1.11	正丁醇	0.59	1.69			
1-甲基-顺-2-乙基环戊烷	0.89	1.12	异丁醇	0.61	1.64			

表 19-48 甾体生物碱的 NPD/FID 响应比[18]

化合物	$\frac{NPD}{FID}$响应比	化合物	$\frac{NPD}{FID}$响应比
藜兰士林	3.04	澳洲茄次碱	3.02
茄次碱	2.96	番茄碱	2.88
垂茄次碱	3.01	芥芬胺	3.43
螺茄二烯	3.06		

第三节　电子捕获检测器(ECD)的校正因子

表 19-49 卤化物与硝基化合物在 ECD 上的摩尔响应值[35]

载气：N_2　放射源：氚　基准物：对氯硝基苯

化合物	s_M	化合物	s_M	化合物	s_M
2,4,6-三氯苯胺	0.0164	2,4,5-三氯硝基苯	2.10	邻二硝基苯	1.29
2,3-二氯苯胺	0.00484	邻氯硝基苯	1.66	邻硝基苯胺	0.302
2,4-二氯苯胺	0.00394	3,4-二氯硝基苯	1.13	间硝基苯胺	0.260
2,5-二氯苯胺	0.00133	2,4-二氯硝基苯	1.11	对二氯苯	1.88
邻氯苯胺	0.000100	对氯硝基苯	1.00	邻溴硝基苯	1.22
间氯苯胺	0.0000312	邻氟硝基苯	0.740	2-硝基-4-氯苯胺	0.214
2,3-二氯硝基苯	2.34	对氟硝基苯	0.685	邻溴苯胺	0.00166
间氯硝基苯	2.21	间氟硝基苯	0.206	氟代苯	0.000107
2,5-二氯硝基苯	2.12	间二硝基苯	1.63	邻氟苯胺	0.000000686

表 19-50 农药在 ECD 上的校正因子[36]

载气，N_2　放射源：氚　基准物：o,p'-DDD

化合物	s_m	化合物	s_m	化合物	s_m
2,3-二氯-1,4-萘醌	0.48	地快乐	0.65	安妥	0.0073
3,5-二氯对硝基苯胺	2.11	克菌丹	0.10	阿特拉津	0.0050
1,2,3-三氯间二硝基苯	3.54	p,p'-DDE	2.34	对二乙苯基-1,1-二氯乙烷	0.012
2,4,4',5-四氯二苯基砜	1.28	p,p'-DDD	1.26	二苯亚硝胺	0.0010
五氯硝基苯	4.80	o,p'-DDD	1.00	四甲基氨荒酸硫	0.59
对氯苯磺酸氯苯酯	1.43	o,p'-DDT	0.90		

表 19-51 部分有机化合物在 ECD 上的摩尔响应值[14]

载气：Ar（含 5%CH_4）　放射源：氚　基准物：1-氯丁烷

化合物	s_M	化合物	s_M	化合物	s_M	化合物	s_M
苯	0.06	丁醇-1	1.0	氯苯	75	溴苯	450
甲苯	0.2	1-氯己烷	1.1	顺-1,2-二氯乙烯	90	1-2-溴丙烯	4×10^3
丙酮	0.5	1-氯庚烷	1.5	1,1-二氯丁烷	110	2,3-丁二酮	5×10^4
2-氯甲苯	0.55	1-氯辛烷	1.6	1,2-二氯乙烷	190	氯仿	6×10^4
4-氯甲苯	0.55	1-氯-2-甲基丙烷	1.7	1-溴丙烷	255	1-碘丁烷	9×10^4
正丁醚	0.6	2-氯丁烷	2.0	1-溴丁烷	280	1,1-二溴乙烷	1.1×10^5
丁酸甲酯	0.9	三氯醋酸正庚酯	4.5	溴代环戊烷	280	四氯化碳	4×10^6
1-氯丁烷	1.0	2-氯-2-甲基丙烷	12	反-1,2-二氯乙烯	370		
1-氯戊烷	1.0	1,4-二氯丁烷	15	五氟丙酸正丙酯	450		

参 考 文 献

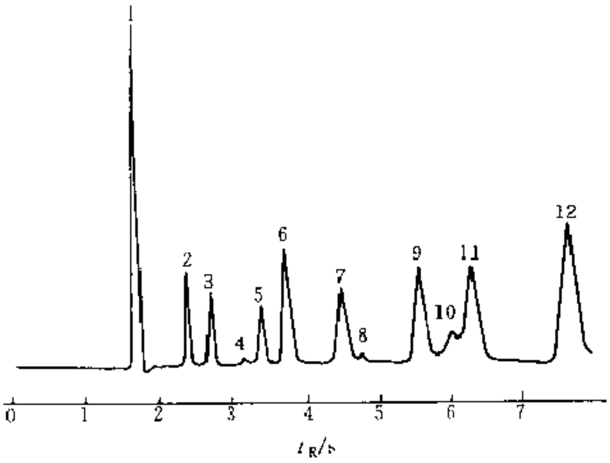
1 GB 10410.1—89. 中国国家标准汇编. 1992; 129; 183
2 GB 10410.2—89. 中国国家标准汇编. 1992; 129; 188
3 GB 10410.3—89. 中国国家标准汇编. 1992; 129; 193
4 GB 6013 85. 中国国家标准汇编. 1990; 66; 335
5 GB 6600—86. 中国国家标准汇编. 1990; 74; 153
6 顾蕙祥, 阎宝石. 气相色谱实用手册 (第二版). 北京: 化学工业出版社, 1990; 517～527
7 HB 2027 91
8 van Gelder W M J, Jonker H H, Huizing H J, et al. J Chromatogr, 1988; 442; 133
9 Rosie D M, Barry E F. J Chrom Sci, 1973; 11; 237
10 GB 4117—92
11 GB 4118 92
12 Karasek F W, Fong I. J Chrom Sci, (1971); 9; 497
13 Karasek F W. J Chrom Sci, 1970; 8; 282
14 Devaux P, Guiochon G. J Gas Chrom, 1967; 5; 341
15 Hoffman E G. Anal Chem, 1962; 34; 1216
16 罗春荣, 林炳承, 李浩春. 色谱, 1986; 1; 171
17 Dietz W A. J Chrom Sci, 1972; 10; 423
18 吴惠勤, 张桂英, 何守明等. 分析测试学报, 1996; 15 (4); 5
19 Cucarella M C M. J Gas Chrom, 1986; 6; 39
20 Husek P. J Chromatogr B, 1995; 669; 352
21 Simek P, Heydova A, Jegorov A. HRC, 1994; 17; 145
22 Terrill, J B, Jacobs E S. J Chrom Soc, 1970; 8; 604
23 Dalton R W, Kohlbeck J A, Bolleter W T. J Chromatogr, 1970; 50; 219
24 Askew W C, Maduskar K D. J Chrom Sci, 1971; 9; 702
25 Karasek F W, Stepanik T. J Chrom Sci, 1972; 10; 573
26 Karasek F W, Grimard A I, Deelstra B L. J Chrom Sci, 1972; 10; 726
27 Karasek F W, Vassilakopules P. Chromatographia, 1971; 4; 389
28 Krupcik J, Leclercq P A, Garaj J, et al. J Chromatogr, 1980; 191; 207
29 周卯星, 黄利群. 分析测试学报, 1992; 11 (3); 53
30 Alonso L. Chromatographia, 1993; 35; 694
31 Simek P, Heydova A, Jegorov A. HRC, 1994; 17; 145
32 Woo K L, Lee D S. J Chromatogr B, 1995; 665; 15
33 贡献, 陈周平.《气相色谱法与白酒分析》. 四川: 科学科技出版社, 1989; 156～204
34 沈尧绅, 曾祖训.《白酒气相色谱分析》. 北京: 轻工业出版社, 1986; 79～114
35 Zielinskin W L, Jr, Fishhein L, Thomas R O. J Chromatogr, 1967; 30; 77
36 Zielinski W L, Jr, Fishbein L, Martin L, Jr. J Gas Chrom, 1967; 5; 552

(李浩春 叶 芬)

第三篇 谱图选集

第二十章 烃类化合物色谱图

第一节 脂肪烃类色谱图



色谱峰：1—甲烷；2—正戊烷；3—2，2-二甲基丁烷；4—2-甲基戊烷；5—3-甲基戊烷；6—正己烷；7—2，4-二甲基戊烷；8—2，2，3-三甲基丁烷；9—环己烷；10—2-甲基己烷；11—3-甲基己烷；12—正庚烷

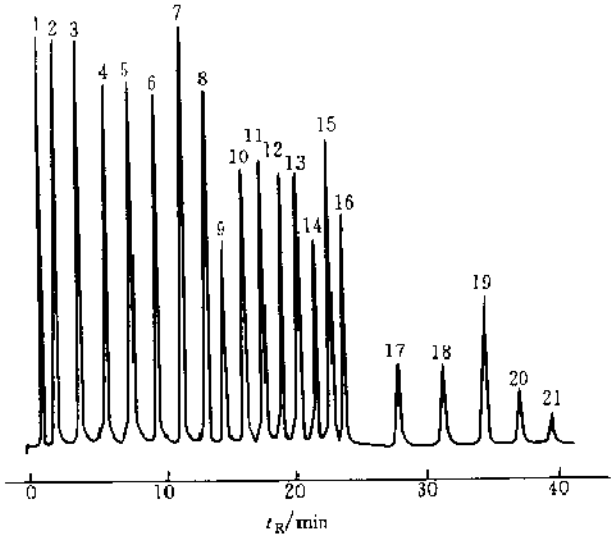
色谱柱：角鲨烷，0.85m×0.065mm

柱温：0℃

载气：He（含 φ=0.1%CH_4），$\bar{u}$=60cm·s^{-1}

检测器：FID

图 20-1 戊烷～庚烷[1]



色谱峰：1—正戊烷；2—正己烷；3—正庚烷；4—正辛烷；5—正壬烷；6—正癸烷；7—正十一烷；8—正十二烷；9—正十三烷；10—正十四烷；11—正十五烷；12—正十六烷；13—正十七烷；14—正十八烷；15—正十九烷；16—正二十烷；17—正二十四烷；18—正二十八烷；19—正三十二烷；20—正三十六烷；21—正四十烷

色谱柱：SE-30

柱温：−10℃(8min)→300℃，10℃·min^{-1}

载气：H_2、30ml·min^{-1}

检测器：FID

图 20-2 正戊烷～正四十烷

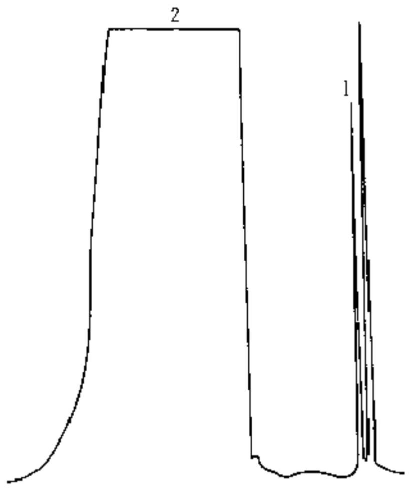


图 20-3 含饱和水的正庚烷[2]

色谱峰：1—水；2—正庚烷
色谱柱：GDX-105，1m×4mm
柱　温：138 ℃
载　气：H_2，40ml・min^{-1}
检测器：TCD

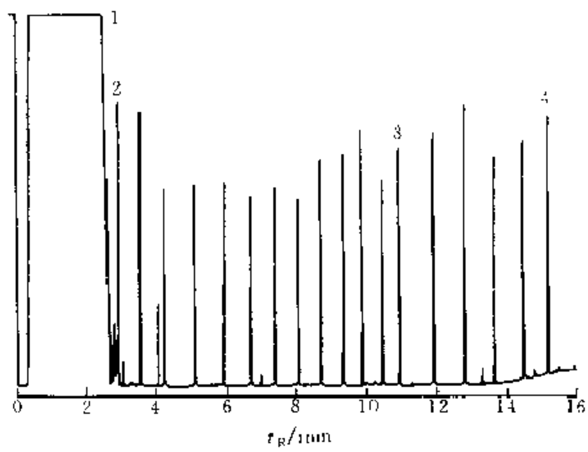


图 20-4 正辛烷～正二十烷[3]

色谱峰：1—正己烷（溶剂）；2—正辛烷；3—正二十烷；4—正三十烷
色谱柱：Ultra-1，20m×0.32mm，d_f—0.5μm
柱　温：40 ℃（1min）→320 ℃，20 ℃・min^{-1}
载　气：He，100kPa
检测器：FID
进样方式：程序加热

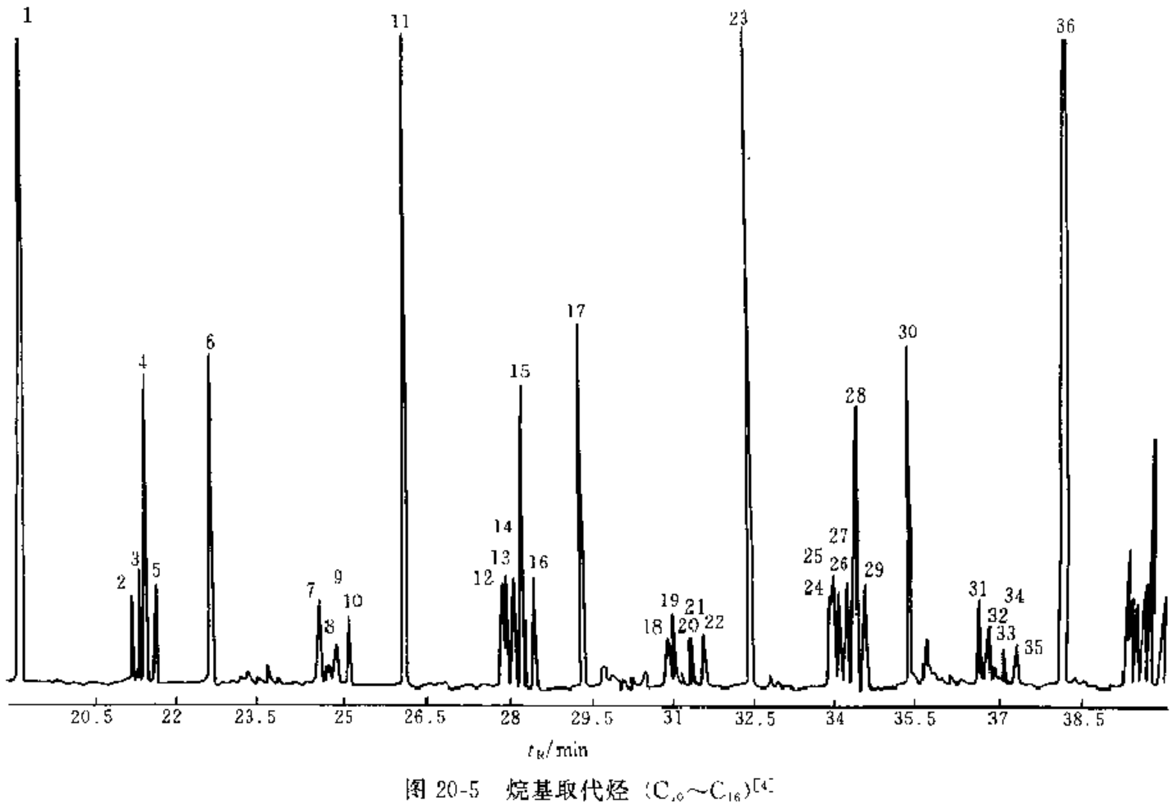


图 20-5 烷基取代烃（C_{10}～C_{16}）[4]

色谱峰：1—正癸烷；2—5-甲基癸烷；3—4-甲基癸烷；4—2-甲基癸烷；5—3-甲基癸烷；6—正十一烷；7—5-甲基十一烷；8—4-甲基十一烷；9—2-甲基十一烷；10—3-甲基十一烷；11—正十二烷；12—6-甲基十二烷；13—5-甲基十二烷；14—4-甲基十二烷；15—2-甲基十二烷；16—3-甲基十二烷；17—正十三烷；18—7-甲基十三烷；19—5-甲基十三烷；20—4-甲基十三烷；21—2-甲基十三烷；22—3-甲基十三烷；23—正十四烷；24—7-甲基十四烷；25—6-甲基十四烷；26—5-甲基十四烷；27—4-甲基十四烷；28—2-甲基十四烷；29—3-甲基十四烷；30—正十五烷；31—7-甲基十五烷；32—5-甲基十五烷；33—4-甲基十五烷；34—2-甲基十五烷；35—3-甲基十五烷；36—正十六烷
色谱柱：甲基硅烷，50m×0.2mm，d_f—0.50μm
柱　温：40 ℃→300 ℃，5 ℃・min^{-1}
载　气：He，1ml・min^{-1}
检测器：FID
气化室温度：325 ℃
检测器温度：325 ℃

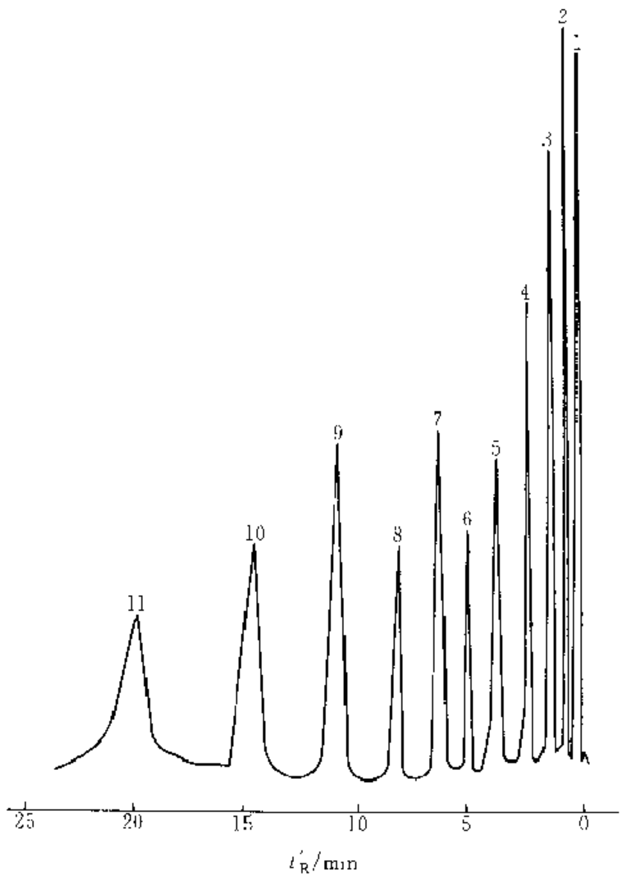


图 20-6 正癸烷～正二十烷

色谱峰：1—正癸烷；2—正十一烷；3—正十二烷；4—正十三烷；5—正十四烷；6—正十五烷；7—正十六烷；8—正十七烷；9—正十八烷；10—正十九烷；11—正二十烷

色谱柱：GDX-103（60 目～70 目），2m×3mm

柱　温：290 ℃

载　气：H_2

检测器：TCD

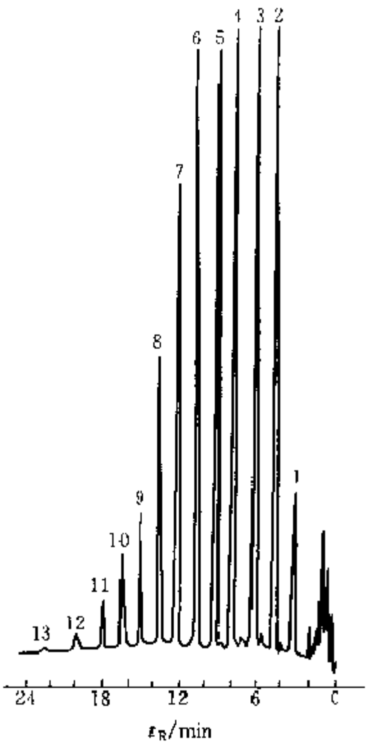


图 20-7 正癸烷～正二十二烷

色谱峰：1—正癸烷；2—正十一烷；3—正十二烷；4—正十三烷；5—正十四烷；6—正十五烷；7—正十六烷；8—正十七烷；9—正十八烷；10—正十九烷；11—正二十烷；12—正二十一烷；13—正二十二烷

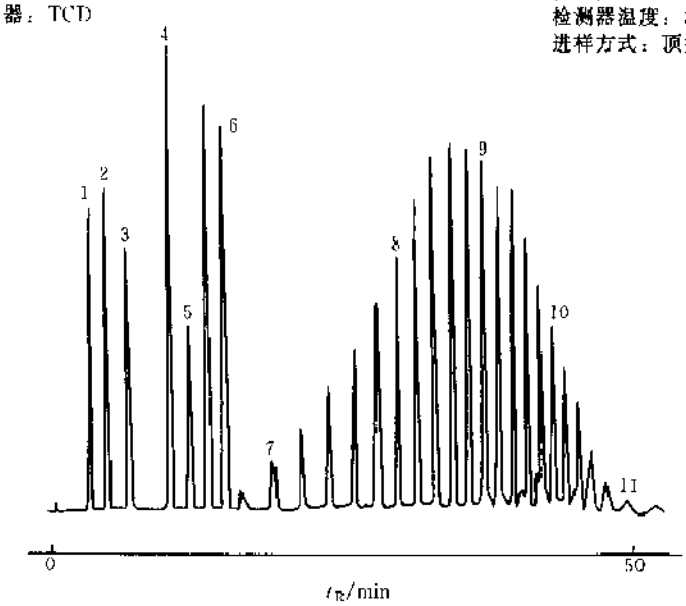
色谱柱：3%OV-17,Chromosorb W HP（100 目～120 目）,2

柱　温：90 ℃→240 ℃，10 ℃·min^{-1}

检测器：FID

检测器温度：320 ℃

进样方式：顶空法（气化温度 320 ℃，样品 140 ℃）



色谱峰：1—正癸烷；2—正十一烷；3—正十二烷；4—正十四烷；5—正十五烷；6—正十七烷；7—正二十烷；8—正三十烷；9—正四十烷；10—正五十烷；11—正六十烷

色谱柱：2%Dexsil 300，Chromosorb G（80 目～100 目），1.52m×3mm

柱　温：50 ℃→390 ℃，8 ℃·min^{-1}

载　气：N_2，40ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：400 ℃

检测器温度：400 ℃

图 20-8 正癸烷～正六十烷[5]

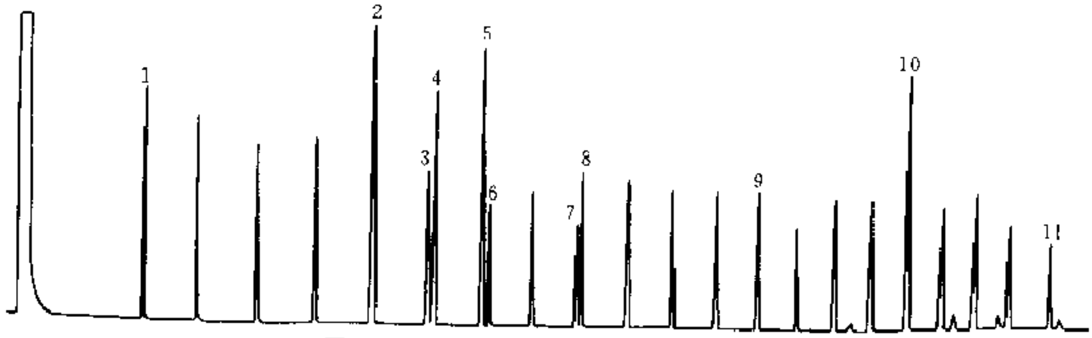
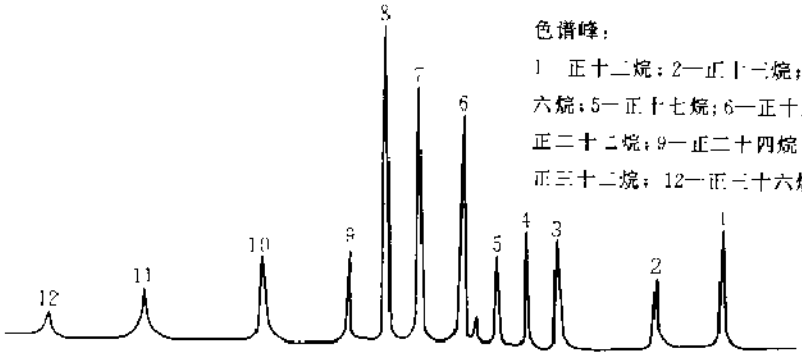


图 20-9　正十二烷～正三十二烷[6]

色谱峰：1—正十二烷；2—正十六烷；3—正十七烷；4—姥鲛烷；5—正十八烷；6—植烷；7—1-二十烯；8—正二十烷；9—正二十四烷；10—正二十八烷；11—正三十二烷

色谱柱：OV-101，32m
柱　温：80 ℃→280 ℃，4 ℃·min^{-1}
载　气：He，$\overline{u}$=58cm·s^{-1}
检测器：FID



色谱峰：

1—正十二烷；2—正十三烷；3—正十五烷；4—正十六烷；5—正十七烷；6—正十八烷；7—正二十烷；8—正二十二烷；9—正二十四烷；10—正二十八烷；11—正三十二烷；12—正三十六烷

图 20-10　正十二烷～正三十六烷[7]

色谱柱：甲基乙烯基硅烷，20m×0.25mm
柱　温：120 ℃（5min）→300 ℃，20 ℃·min^{-1}
载　气：H_2，u=30cm·s^{-1}
检测器：FID

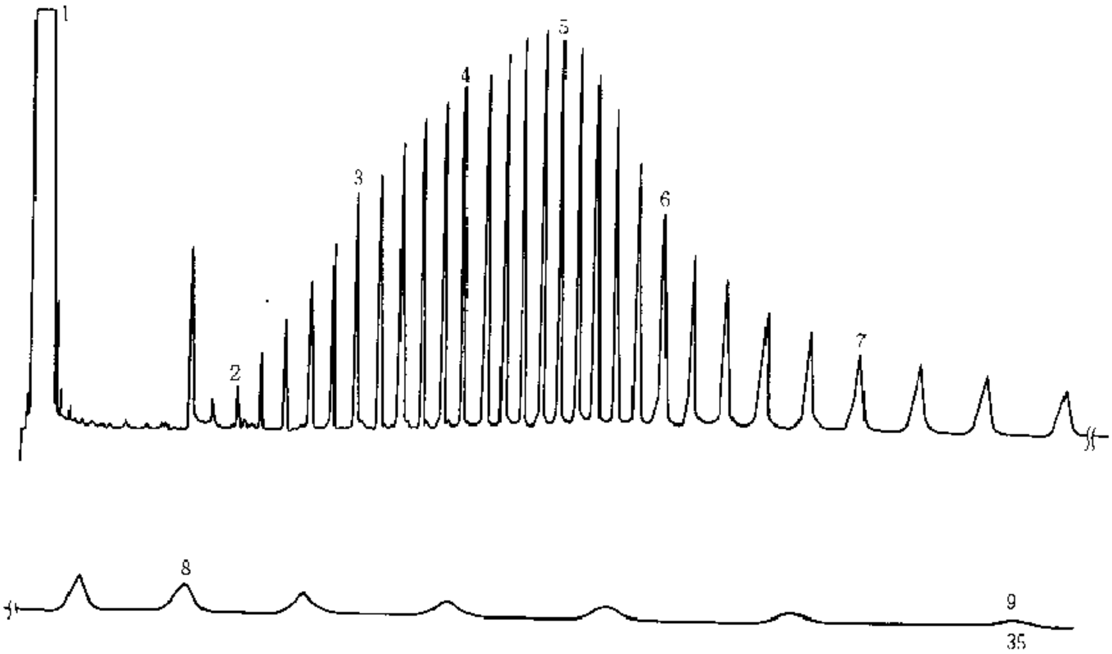
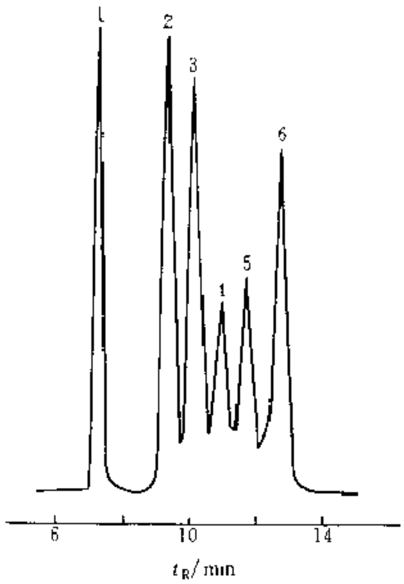


图 20-11　正三十烷～正六十五烷[8]

色谱峰：1—正十六烷（溶剂）；2—正三十烷；3—正三十五烷；4—正四十烷；5—正四十五烷；6—正五十烷；7—正五十五烷；8—正六十烷；9—正六十五烷
色谱柱：SE 54，7m×0.32mm
柱　温：200 ℃→340 ℃，150 ℃·min^{-1}

载　气：H_2，u=80cm·s^{-1}
检测器：FID
气化室温度：200 ℃
进样方式：柱上进样



色谱峰：1—3-甲基-1-丁烯；2—1-戊烯；3—2-甲基-1-丁烯；4—反-2-戊烯；5—顺-2-戊烯；6—2-甲基-2-丁烯

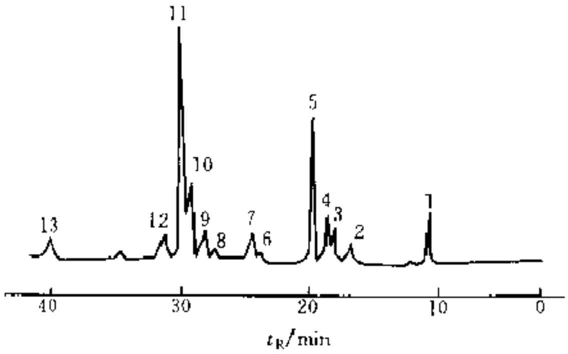
色谱柱：30%聚丙二醇-550，耐火砖(60目～80目)，6.10m×6mm

柱　温：25 ℃

载　气：He，48ml·min^{-1}

检测器：TCD

图 20-12　戊烯[9]



色谱峰：1—正戊烷；2—4-甲基-1-戊烯；3—4-甲基-顺-2-戊烯；4—2，3-二甲基-1-丁烯；5—4-甲基-反-2-戊烯；6—2-甲基-1-戊烯；7—1-己烯；8—顺-3-己烯；9—反-3-己烯；10—反-2-己烯；11—2-甲基戊-2-烯；12—顺-2-己烯；13—2，3-二甲基-2-丁烯

色谱柱：角鲨烷，100m

柱　温：0 ℃

载　气：H_2

检测器：FID

图 20-13　己烯[10]

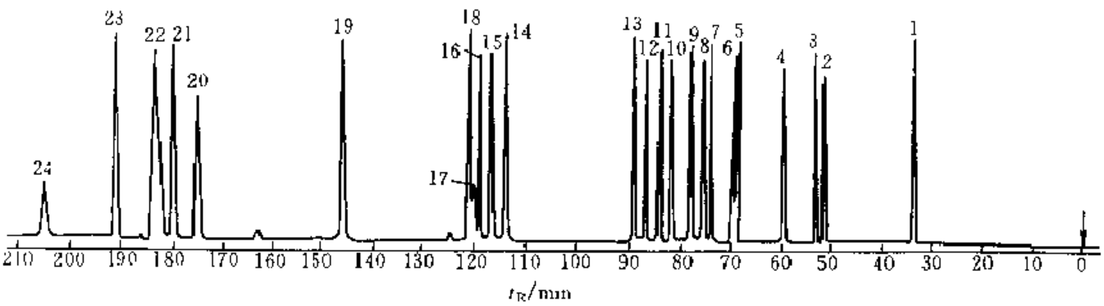


图 20-14　己烯与己二烯[11]

色谱峰：1—正戊烷；2—2，3-二甲基丁烷；3—2-甲基戊烷；4—3-甲基戊烷；5—正己烷；6—己烯+1，5-己二烯；7—反-3-己烯；8—顺-3-己烯；9—反-2-己烯；10—1-反-4-己二烯；11—顺-2-己烯；12—1-顺-4-己二烯；13—甲基环戊烷；14—2，3-己二烯；15—1-己炔；16—1，2-己二烯；17—1-顺-3-己二烯；18—1-反-3-己二烯；19—3-己炔；20—反-2，反-4-己二烯；21—2-己炔；22—正庚烷；23—顺-2，反-4-己二烯；24—顺-2，顺-4-己二烯

色谱柱：脂肪腈，200m×0.5mm

柱　温：22 ℃

载　气：He，3.5ml·min^{-1}

检测器：FID

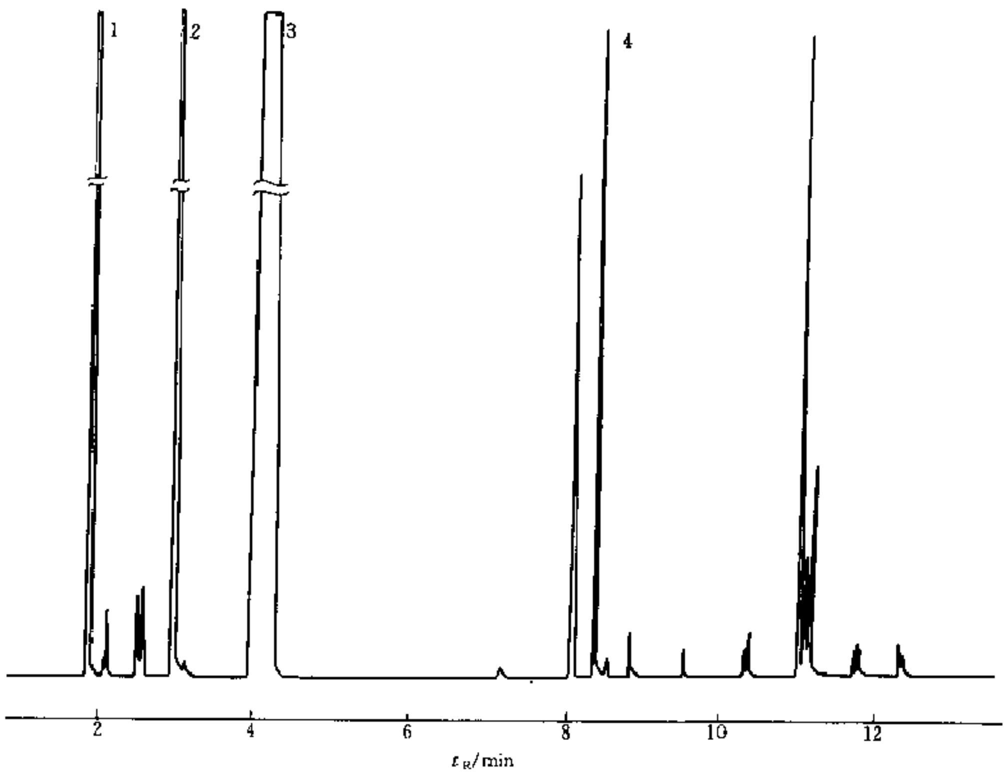


图 20-15　环辛二烯[12]

色谱峰：1—丁二烯；2—乙烯基环己烯；3—1，5 环辛二烯；4—1，5，9-环十二碳三烯

色谱柱：SE-54，28m×0.25mm

柱　温：100℃（4min）→260℃，15℃·min⁻¹

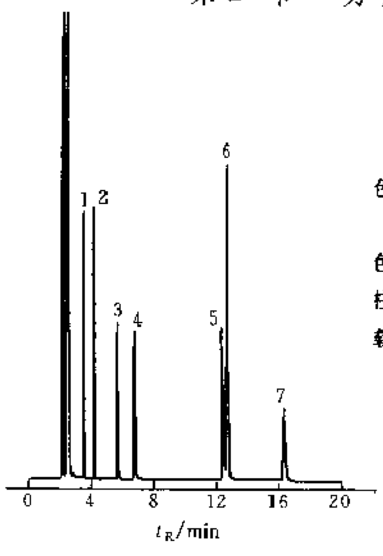
载　气：N_2，0.085MPa

检测器：FID

气化室温度：280℃

检测器温度：280℃

第二节　芳烃色谱图



色谱峰：1—正辛烷；2—苯；3—正壬烷；4—甲苯；5—对二甲苯；6—间二甲苯；7—邻二甲苯

色谱柱：Carbopack B PLOT 柱，30m×0.32mm

柱　温：60℃

载　气：He

图 20-16　二甲苯[13]

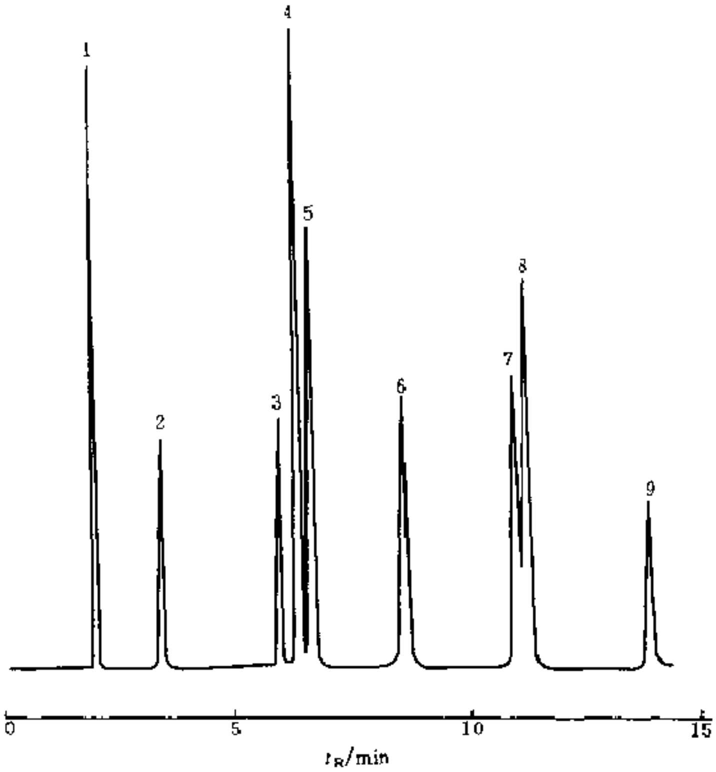


图 20-17　C_6～C_9 芳烃（一）[14]

色谱峰：1—苯；2—甲苯；3—乙基苯；4—对二甲苯；5—间二甲苯；6—邻二甲苯；7—对甲基乙基苯；8—间甲基乙基苯；9—邻甲基乙基苯

色谱柱：PEG 20M 交联柱，19m×0.25mm　　载　气：N_2，$\bar{u}=12cm \cdot s^{-1}$

柱　温：40℃

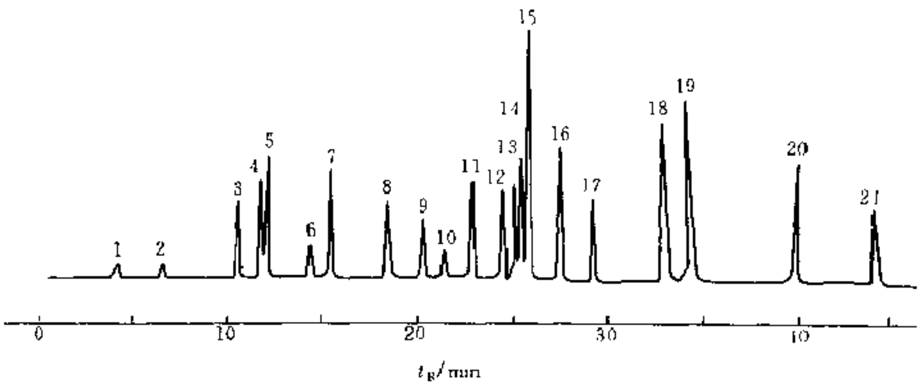


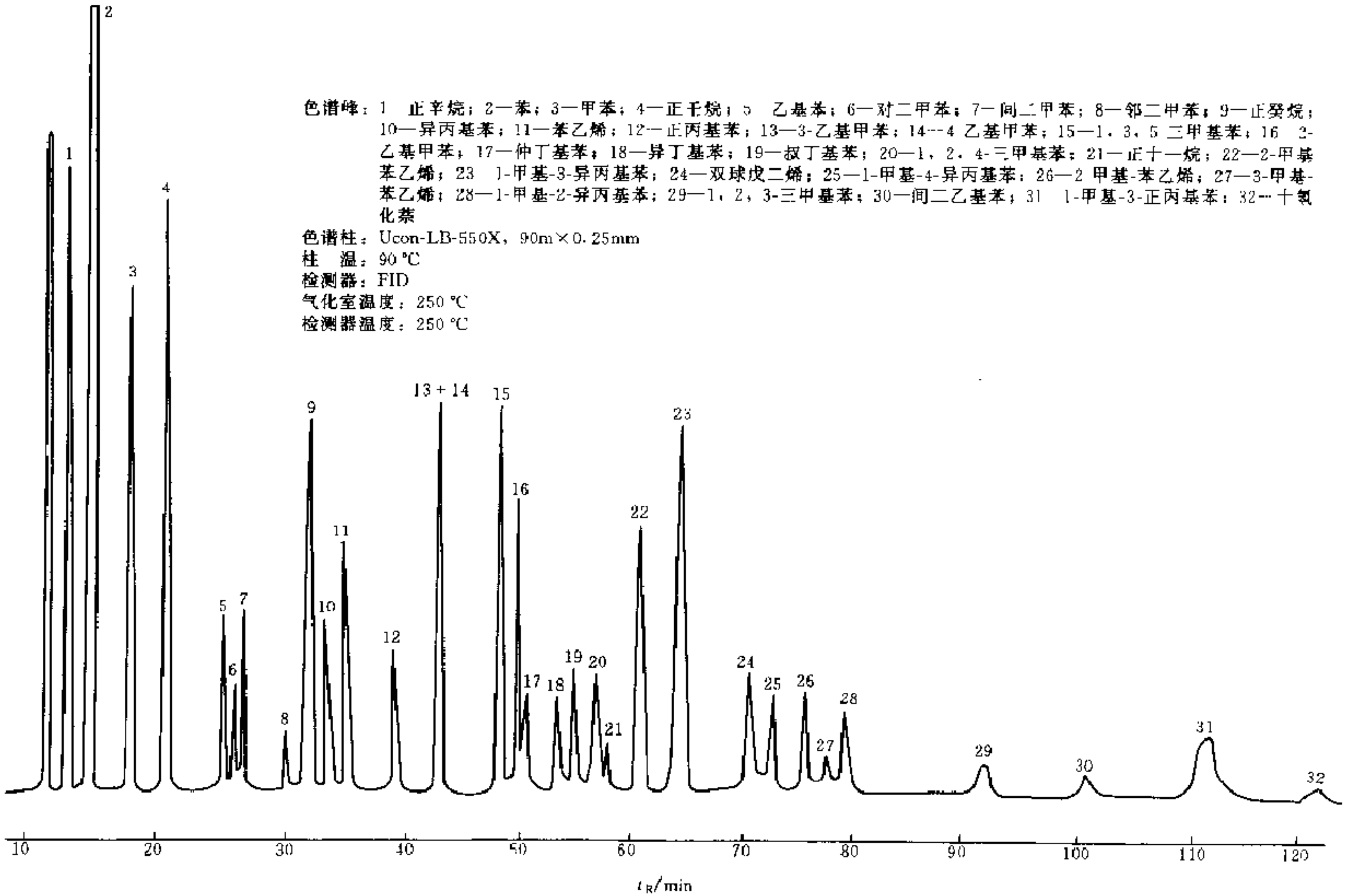
图 20-18　C_6～C_9 芳烃（二）[15]

色谱峰：1—苯；2—甲苯；3—乙基苯；4—间二甲苯；5—对二甲苯；6—异丙基苯；7—邻二甲苯；8—正丙基苯；9—间乙基甲苯；10—对乙基甲苯；11—叔丁基苯；12—1，3，5-三甲基苯；13—正丁基苯；14—邻乙基甲苯；15—异丁基苯；16—间异丙基苯甲烷；17—对异丙基苯甲烷；18—1，2，4-三甲基苯；19—邻异丙基苯甲烷；20—茚；21—1，2，3 三甲基苯

色谱柱：4%邻苯二甲酸二丙基四氯酯+1.5%角鲨烷，60m×0.25mm　　载　气：H_2

检测器：FID

柱　温：70℃



色谱峰：1—正辛烷；2—苯；3—甲苯；4—正壬烷；5—乙基苯；6—对二甲苯；7—间二甲苯；8—邻二甲苯；9—正癸烷；10—异丙基苯；11—苯乙烯；12—正丙基苯；13—3-乙基甲苯；14—4-乙基甲苯；15—1，3，5-三甲基苯；16—2-乙基甲苯；17—仲丁基苯；18—异丁基苯；19—叔丁基苯；20—1，2，4-三甲基苯；21—正十一烷；22—2-甲基苯乙烯；23—1-甲基-3-异丙基苯；24—双环戊二烯；25—1-甲基-4-异丙基苯；26—2-甲基-苯乙烯；27—3-甲基-苯乙烯；28—1-甲基-2-异丙基苯；29—1，2，3-三甲基苯；30—间二乙基苯；31—1-甲基-3-正丙基苯；32—十氢化萘

色谱柱：Ucon-LB-550X，90m×0.25mm

柱　温：90℃

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：250℃

图 20-19　C_6～C_{10}芳烃（ ）[16]

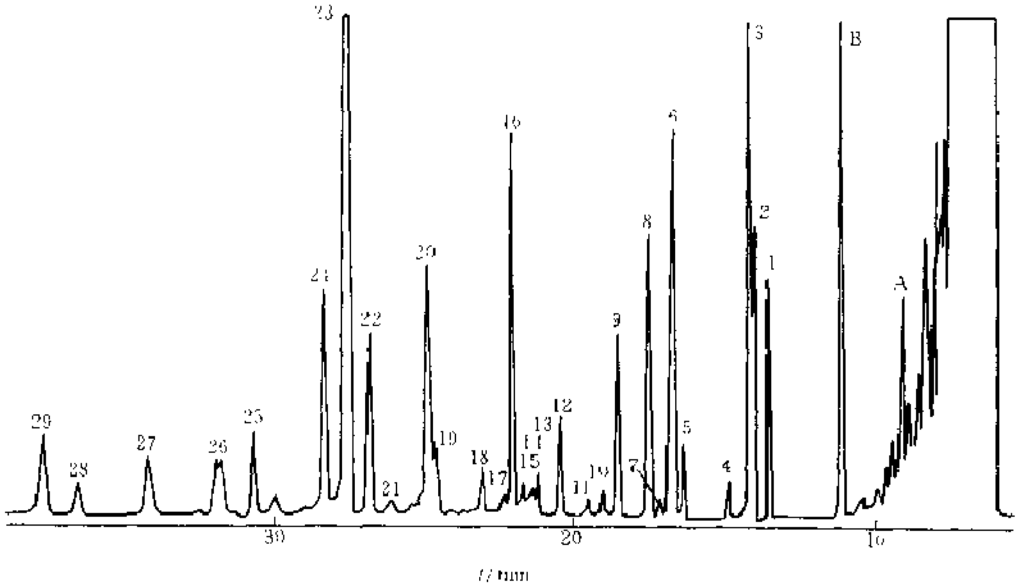


图 20-20　C_6～C_{10}芳烃（二）[17]

色谱峰：A—苯；B—甲苯；1—乙基苯；2—对二甲基苯；3—间二甲基苯；4—异丙基苯；5—正丙基苯；6—邻二甲基苯；7—异丁基苯；8—3-乙基甲苯+4-乙基甲苯+仲丁基苯+叔丁基苯；9—1，3，5-三甲基苯；10—1-甲基-3-异丙基苯；11—1-甲基-4-异丙基苯；12—2-乙基甲苯；13—1-甲基-3-正丙基苯；14—1，4-二乙基苯+苯乙烯；15—正丁苯；16—1-甲基-4-正丙基苯+1，2，4-三甲基苯；17—1-甲基-2-异丙基苯+1，3-二乙基苯；18—1，3-二甲基-5-乙基苯；19—1，2-二乙基苯；20—1-甲基-2-正丙基苯；21—α-甲基苯乙烯；22—1，4-二甲基-2-乙基苯；23—1，2，3-三甲基苯+1，3-二甲基-4-乙基苯；24—1，2-二甲基-4-乙基苯；25—茚；26—1，3-二甲基-2-乙基苯；27—1，2-二甲基-3-乙基苯；28—1，2，4，5-四甲基苯；29—1，2，3，5-四甲基苯

色谱柱：1，2，3-三（2-氰乙氧基）丙烷，100m×0.25mm

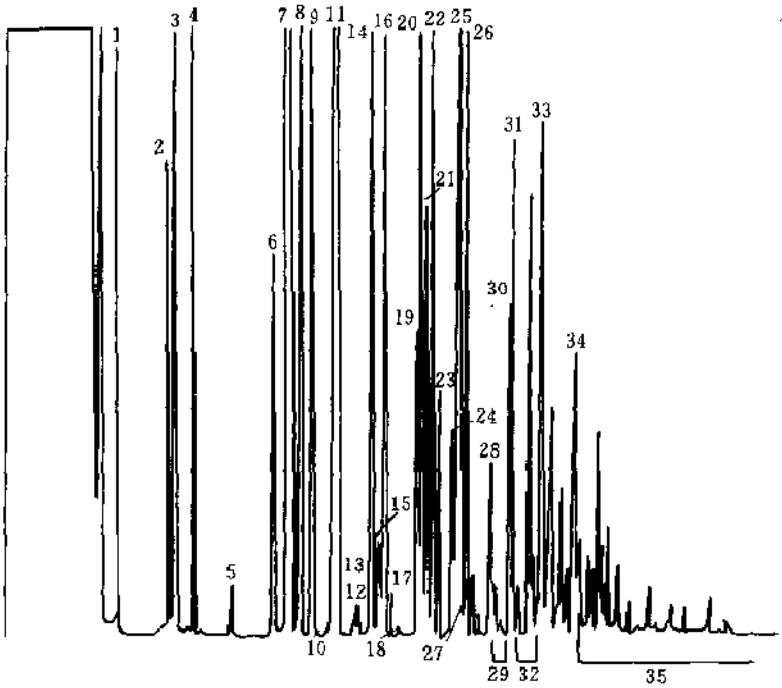
柱　温：50℃（4min）→90℃，5℃·min^{-1}

载　气：He，2.15ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：220℃

检测器温度：160℃



色谱峰：

1—甲苯；2—乙基苯；3—对二甲苯+间二甲苯；4—邻二甲苯；5—异丙基苯；6—正丙基苯；7—1-甲基-3-乙基苯+1-甲基-4-乙基苯；8—1，3，5-三甲基苯；9—1-甲基-2-乙基苯；10—叔丁基苯；11—1，2，4-三甲基苯；12—异丁基苯；13—仲丁基苯；14—1，2，3-三甲基苯；15—1-甲基-3-异丙基苯；16—茚+1-甲基-4-异丙基苯；17—甲基茚；18—甲基茚；19—1-甲基-2-异丙基苯；20—1，3-二乙基苯；21—1-甲基-3-正丙基苯+正丁基苯；22—1-甲基-4-正丙基苯+1，2-二乙基苯；23—1，4-二乙基苯；24—1，3-二甲基-5-乙基苯；25—1，4-二甲基-2-乙基苯+1-甲基-2-正丙基苯；26—1，2-二甲基-4-乙基苯；27—1，3-二甲基-2-乙基苯；28—1，2-二甲基-3-乙基苯；29—C_{11}芳烃+甲基茚；30—1，2，4，5-四甲基苯；31—1，2，3，5-四甲基苯；32—C_{11}芳烃；33—1，2，3，4-四甲基苯；34—萘；35—甲基萘+C_{11}芳烃

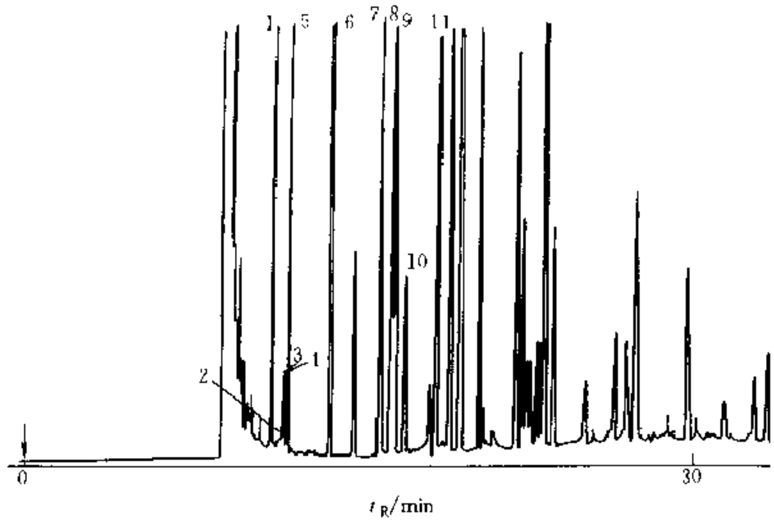
图 20-21　C_7～C_{11}芳烃[18]

色谱柱：OV-1，30m×0.32mm，d_f=0.6μm

柱　温：45℃（10min）→，3℃·min^{-1}

载　气：H_2，5ml·min^{-1}

检测器：FID



色谱峰：1—叔丁醇；2—甲醇；3—正十二烷；4—异丙醇；5—苯；6—甲苯；7—乙基苯；8—对二甲基苯；9—间二甲基苯；10—正丁醇；11—邻二甲基苯

色谱柱：1，2，3-三（2-氰乙氧基）丙烷，50m×0.25mm

柱　温：95℃→120℃，2.5℃·min^{-1}

载　气：N_2，90kPa

检测器：FID

图 20-22　芳烃与脂肪醇[19]

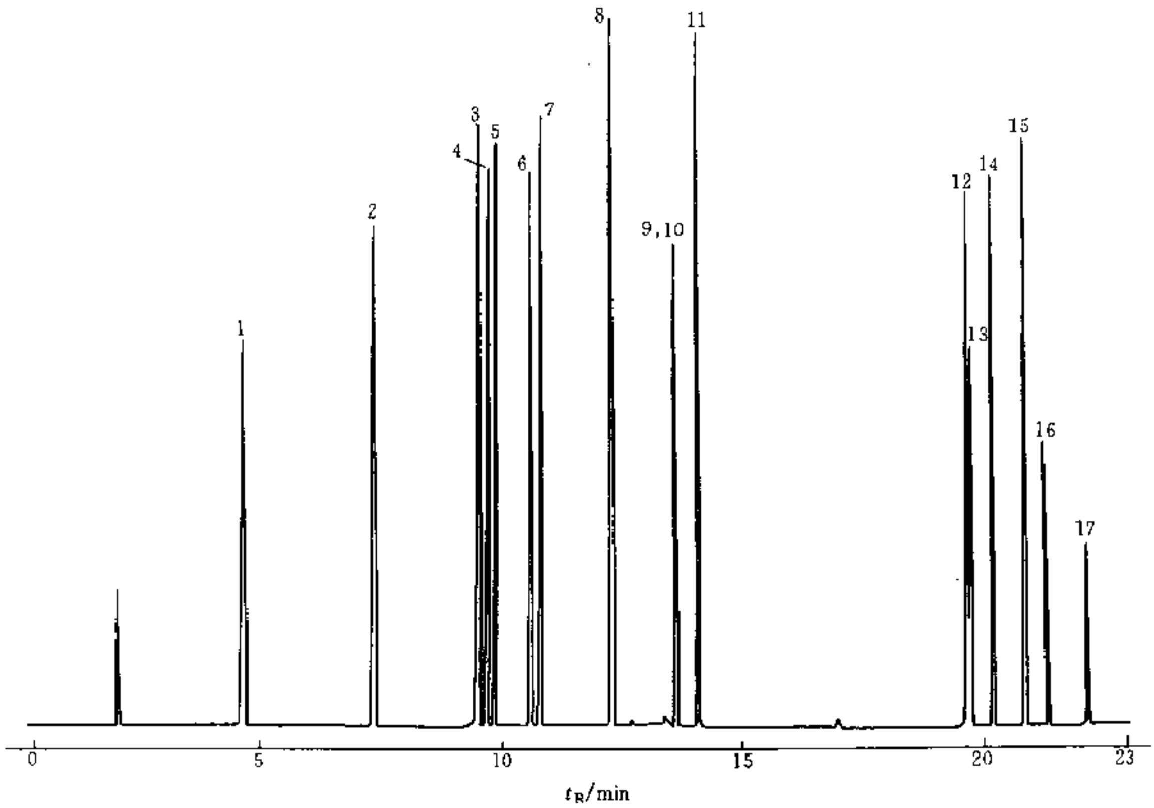


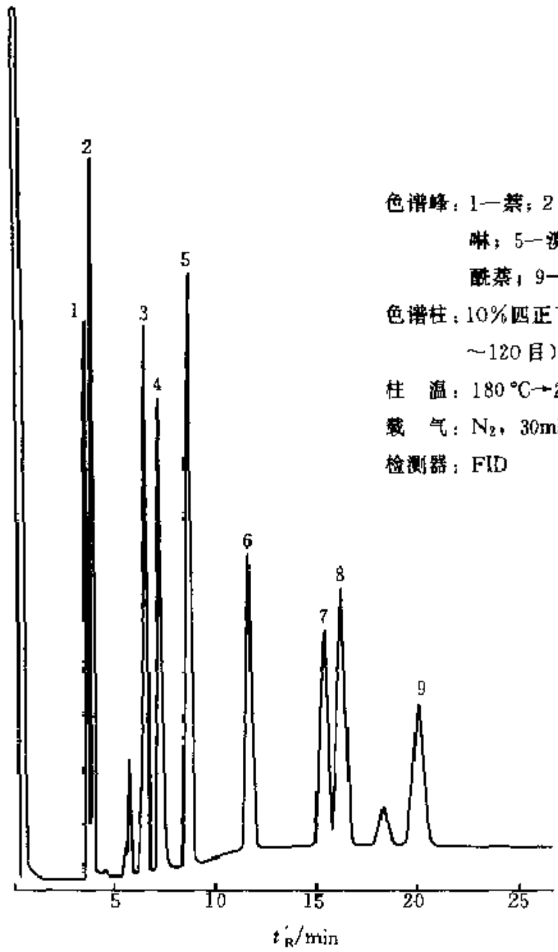
图 20-23　芳烃——NIOSH 方法 1501 与 2005[20]

色谱峰：1—苯；2—甲苯；3—乙基苯；4—对二甲苯；5—间二甲苯；6—异丙基苯；7—邻二甲苯；8—苯乙烯；9—α-甲基苯乙烯；10—对叔丁基甲苯；11—乙烯基甲苯；12—硝基苯；13—萘；14—邻硝基甲苯；15—间硝基甲苯；16—间硝基甲苯；17—对硝基氯苯

色谱柱：DB-Wax，30m×0.32mm，d_f=0.5μm　　检测器：FID

柱　温：40℃（5min）→220℃，10℃·min^{-1}　　气化室温度：250℃

载　气：He，u=35cm·s^{-1}（40℃）　　检测器温度：300℃



色谱峰：1—萘；2—1，4-苯并二噁烷；3—氯代萘；4—异喹啉；5—溴代萘；6—碘代萘；7—氰代萘；8—1 乙酰萘；9—硝基萘

色谱柱：10%四正丁基铵四氟硼酸盐，Chromosorb P（100 目～120 目），2m×2mm

柱　温：180℃→230℃，5℃·min^{-1}

载　气：N_2，30ml·min^{-1}

检测器：FID

图 20-24　萘的衍生物[21]

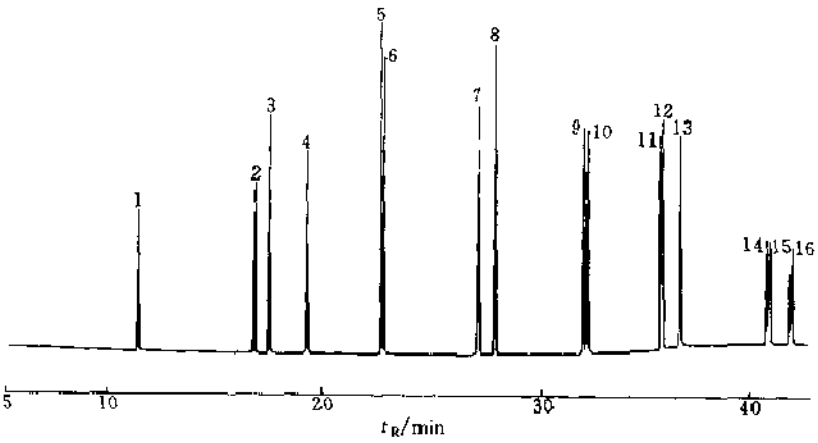


图 20-25　多环芳烃（一）[24]

色谱峰：1—萘；2—苊烯；3—苊；4—芴；5—菲；6—蒽；7—荧蒽；8—芘；9—䓛；10—苯并［*a*］蒽；11—苯并［*k*］荧蒽；12—苯并［*b*］荧蒽；13—苯并［*a*］芘；14—茚并［1，2，3 *cd*］芘；15—二苯并［*a*，*h*］蒽；16—苯并［*ghi*］苝

色谱柱：BP×625，25m×0.22mm，d_f=0.25μm

柱　温：50℃（2min）→290℃（10min），8℃·min^{-1}

检测器：MS

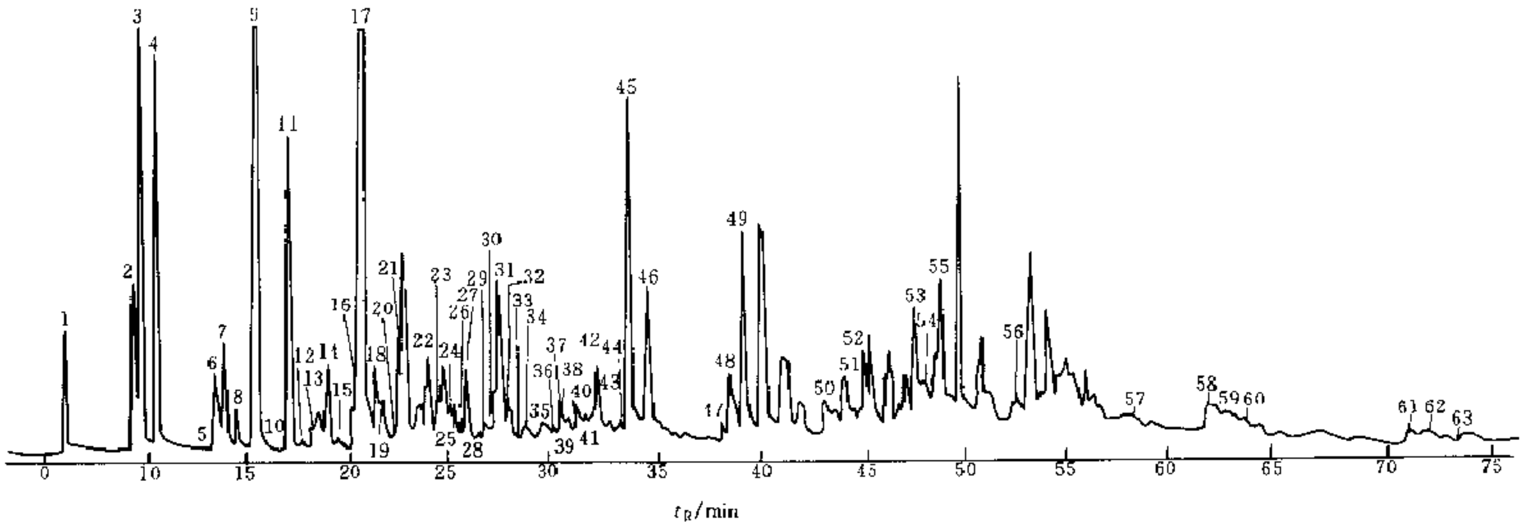


图 20 26 多环芳烃(二)[22]

色谱峰：1—壬烷；2—乙基苯+对二甲苯；3—间二甲苯；4—邻二甲苯；5—异丙基苯；6—3-甲基-1-乙基苯；7—1,3,5-三甲基苯；8—2-甲基-1-乙基苯；9—叔丁基苯；10—三甲基苯；11—1,2,3-三乙基苯；12—1-氢-2,3-二氢茚；13—正丁基苯；14—异丙基甲苯；15—1,3-二乙基苯；16—苯乙酮；17—邻异丙基甲苯；18—$C_{11}H_{16}$芳烃；19—对甲基苯甲醇；20—甲基苄醇；21—四甲基苯；22—$C_{10}H_{12}$；23—1-乙基-3-异丙基苯；24—1-甲基-3-仲丁基苯；25—二甲基异丙基苯；26—1-甲基-4-仲丁基苯；27—1,2,3,4-四甲基苯；28—1-乙基-4-异丙基苯；29—1-乙基-3-正丙基苯；30—$C_{11}H_{16}$；31—萘；32—1,3-二甲基-4-正丙基苯；33—$C_{11}H_{16}$；34—$C_{11}H_{16}$；35—1,2-二甲基-3-正丙基苯；36—1,2,4-三甲基-5-乙基苯；37—$C_{11}H_{16}$；38—1-氢-2,3-二氢-1,3-二甲基茚；39—$C_{11}H_{18}$；40—1-氢-2,3-二氢二甲基茚；41—$C_{11}H_{18}$；42—$C_{11}H_{14}+C_{12}H_{18}$；43—1-氢-2,3-二氢二甲基茚；44—$C_{12}H_{18}$；45—1-甲基萘；46—2-甲基萘；47—1-氢-2,3-二氢-1,1,3-三甲基茚；48—1-乙基萘；49—二甲基萘；50—1,1-甲基-联苯；51—乙基甲基萘；52—三甲基萘；53—1,3-丁基-联苯；54—1,1-二甲基联苯；55—1,1-三甲基联苯；56—四甲基萘；57—1,1-四甲基-联苯；58—蒽；59—$C_{15}H_{14}$；60—二甲基芴；61—2-甲基蒽；62—甲基蒽；63—甲氧基蒽

色谱柱：OV-101，50m×0.25mm

柱　温：60℃ (30min) →180℃ (30min)，3℃·min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：250℃

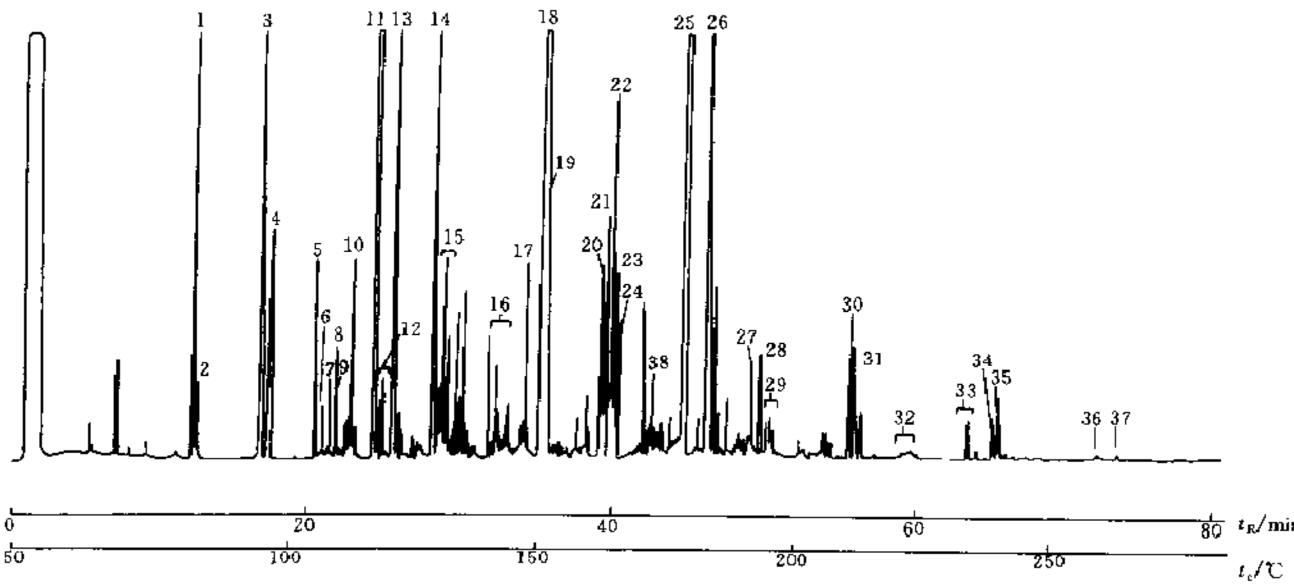


图 20-27　多环芳烃（三）[23]

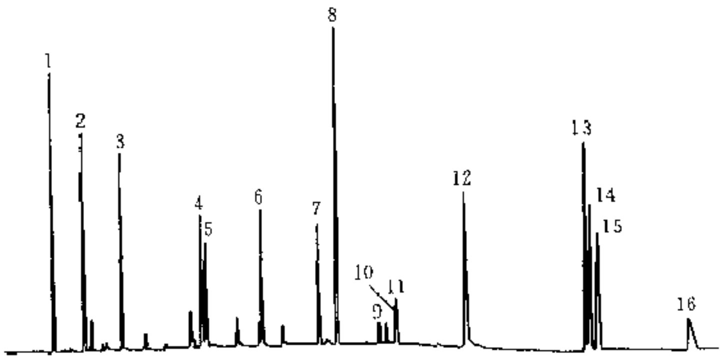
色谱峰：1—萘；2—苯并[b]噻吩；3—2-甲基萘；4—1-甲基萘；5—联苯；6—2-乙基萘；7—2,6 或 2,7-二甲基萘；8—1,7-二甲基萘；9—1,3 或 1,6-二甲基萘；10—苊烯；11—苊；12—C_1-联苯+C_3-萘；13—二苯并呋喃；14—芴；15—C_1-苊烯+C_2-联苯+C_4-萘；16—C_1-芴；17—二苯并噻吩；18—菲；19—蒽；20—3-甲基菲；21—2-甲基菲；22—环戊基[def]菲；23—9 或 4-甲基菲；24—1-甲基菲；25—荧蒽；26—芘；27—苯并[a]芴；28—苯并[b]芴+2 或 4-甲基芘；29—C_1-芘或 C_1-荧蒽；30—苯并[a]蒽；31—䓛或三亚苯；32—C_1 䓛；33—苯并荧蒽；34—苯并[e]芘；35—苯并[a]芘；36—茚并[1,2,3-cd]芘；37—苯并[ghi]芘；38—内标物

色谱柱：DB-50，30m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱　温：50℃（2min）→300℃，3℃·min^{-1}

载　气：He，$\bar{u}$=50cm·s^{-1}

检测器：FID



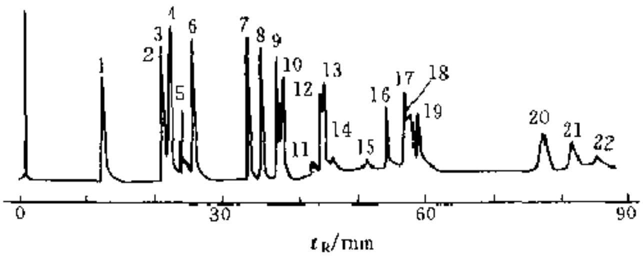
色谱峰：1—联苯；2—苊烯；3—芴；4—菲；5—蒽；6—9-甲基菲；7—荧蒽；8—芘；9—苯并[*a*]芴；10—苯并[*b*]芴；11—1-甲基芘；12—苯稠[9，10]菲；13—苯并[*e*]芘；14—苯并[*a*]芘；15—苝；16—二苯并[*a*，*c*]蒽

色谱柱：OV-3，12m×0.24mm

柱　温：60℃→230℃，2℃·min^{-1}

检测器：FID

图 20-28　多环芳烃（四）[25]



色谱峰：1—芴；2—9-芴酮；3—菲；4—蒽；5—吖啶；6—咔唑；7—荧蒽；8—芘；9—11*H*-苯并[*a*]芴；10—11*H*-苯并[*b*]芴；11—苯并[*c*]菲；12—苯并[*a*]蒽；13—三亚苯；14—䓛；15—萘并萘；16—苯并[*k*]荧蒽；17—苯并[*a*]芘；18—苯并[*e*]芘；19—苝；20—二苯并[*a*，*h*]蒽；21—苯并[*ghi*]芘；22—7*H*-二苯并[*c*，*g*]咔唑

图 20-29　多环芳烃（五）[26]

色谱柱：1%OV-7，Chromosorb W AW-DMCS（80目～100目），5.4m×6mm

载　气：He，75ml·min^{-1}

柱　温：170℃（2min）→190℃，2℃·min^{-1}→280℃，4℃·min^{-1}

检测器：FID

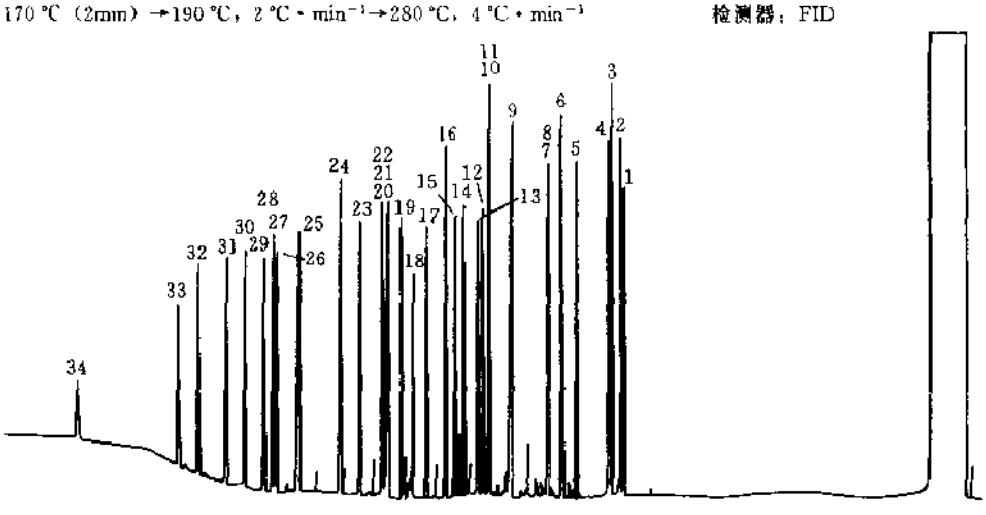


图 20-30　多环芳烃（六）[27]

色谱峰：1—芴-9-酮；2—二苯噻吩；3—菲；4—蒽；5—3-甲基菲；6—1-甲基菲；7—9-甲基蒽；8—2-苯基萘；9—荧蒽；10—芘；11—菲-9-卡醛；12—9，10-二甲基蒽；13—苯[*b*]苯并[2，3-*d*]呋喃；14—苯并[*a*]芴；15—2-甲基芘；16—1-甲基芘；17—1-乙基芘；18—10-甲基蒽-9-卡醇；19—9-苯蒽；20—环戊烯并[*cd*]芘；21—苯并[*a*]蒽；22—䓛；23—苯并蒽；24—2，2′-联萘；25—4，5-环硫萘并[*a*]蒽；26—苯并[*k*]荧蒽；27—苯并[*e*]芘；28—苯并[*a*]芘；29—苝；30—联萘并[2，1，1′，2′]噻吩；31—对四联苯；32—茚并[1，2，3-*cd*]芘；33—苯并[*ghi*]苝；34—晕苯

色谱柱：50%甲苯基甲基硅烷，10m×0.25mm

柱　温：70℃（1.5min）→305℃，7℃·min^{-1}

载　气：H_2，$\bar{u}$=60cm·s^{-1}

检测器：FID

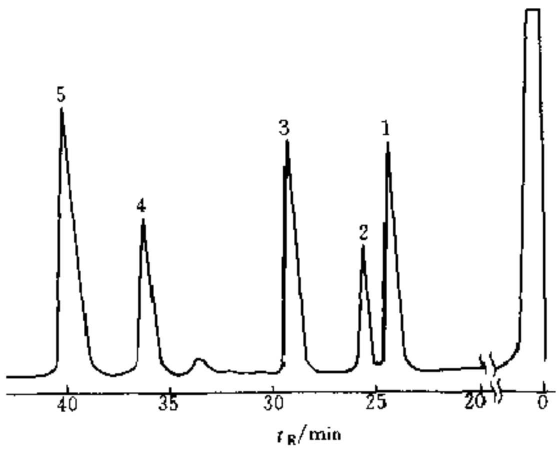


图 20-31 多环芳烃（七）[28]

色谱峰：1—苯[*b*]荧蒽；2—苯[*k*]荧蒽；3—苯[*e*]芘；4—苝；5—苯[*a*]芘

色谱柱：*N*,*N*'-双（对丁氧基亚苄基）-*α*,*α*' 二-对甲苯胺，18m×0.25mm

柱 温：280℃

载 气：H_2，2ml・min^{-1}

检测器：FID

第三节 烃类混合物色谱图

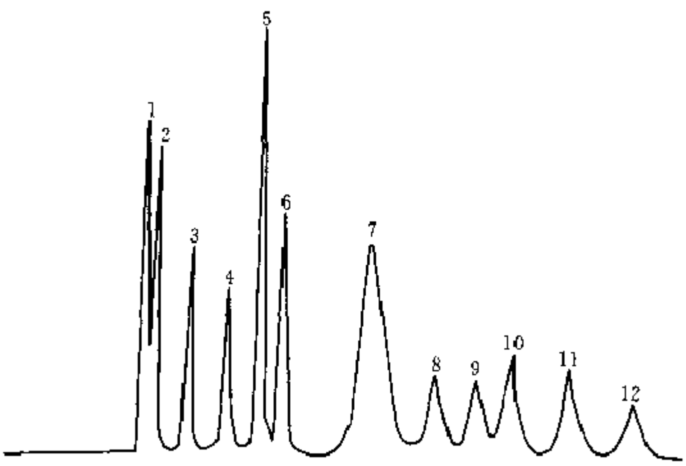


图 20-32 C_1～C_4 烃（一）

色谱峰：1—空气；2—甲烷；3—乙烯＋乙烷；4—乙炔；5—丙烷；6—丙烯；7—异丁烷；8—正丁烷；9—异丁烯；10—反-2-丁烯；11—顺-2-丁烯；12—丁二烯

色谱柱：GDX-501（70 目～90 目），6m×3mm

柱 温：107℃

载 气：H_2，18.8ml・min^{-1}

检测器：TCD

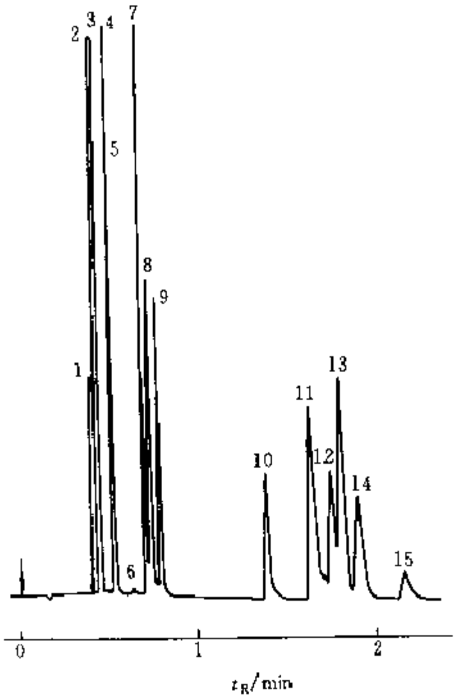


图 20-33 C_1～C_4 烃（二）[29]

色谱峰：1—甲烷；2—乙烷；3—乙烯；4—丙烷；5—丙烯；6—环丙烷；7—乙炔；8—异丁烷；9—正丁烷；10—反-2-丁烯；11—1,3-丁二烯；12—顺-2 丁烯；13—1-丁烯；14—异丁烯；15—丙炔

色谱柱：硅胶 SCOT 柱，10m×0.32mm

柱　温：32 ℃

载　气：He

检测器：FID

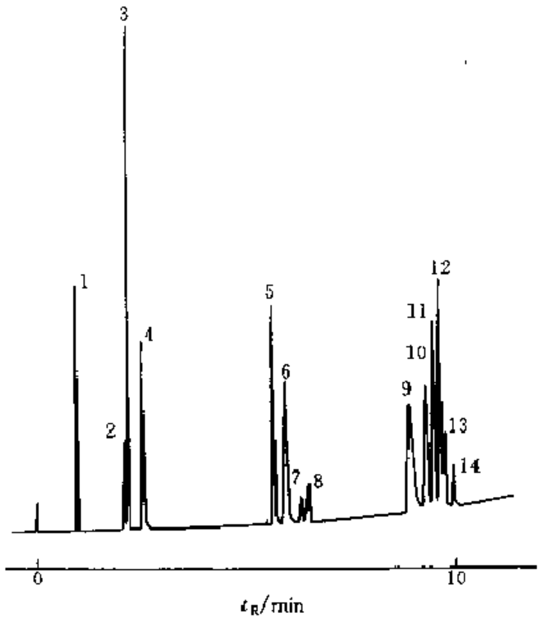


图 20-34 C_1～C_4 烃（三）[30]

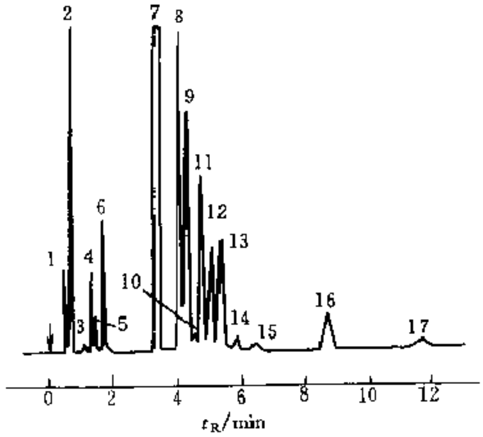
色谱峰：1—甲烷；2—乙烯；3—乙炔；4—乙烷；5—丙烯；6—丙烷；7—丙二烯；8—丙炔；9—异丁烷；10—1-丁烯+1，3-丁二烯；11—异丁烯；12—正丁烷；13—顺-2-丁烯；14—反-2-丁烯

色谱柱：PoraPLOTQ，25m×0.32mm

柱　温：30 ℃（2min）→150 ℃，10 ℃・min^{-1}

载　气：H_2

检测器：FID



色谱峰：1—甲烷；2—乙炔+乙烯+乙烷；3—环丙烷；4—丙烷；5—丙烯；6—丙炔；7—异丁烷；8—1-丁烯；9—正丁烷；10—1-丁炔；11—异丁烯；12—顺-2-丁烯；13—反-2-丁烯；14—2-丁炔；15—1,3-丁二烯；16—异戊烷；17—正戊烷

色谱柱：0.19%苦味酸，Carbopack C（80 目～100 目），20m×3mm

柱　温：35 ℃→70 ℃，6 ℃・min^{-1}

载　气：N_2，30ml・min^{-1}

检测器：FID

图 20-35 C_1～C_5 烃（一）[31]

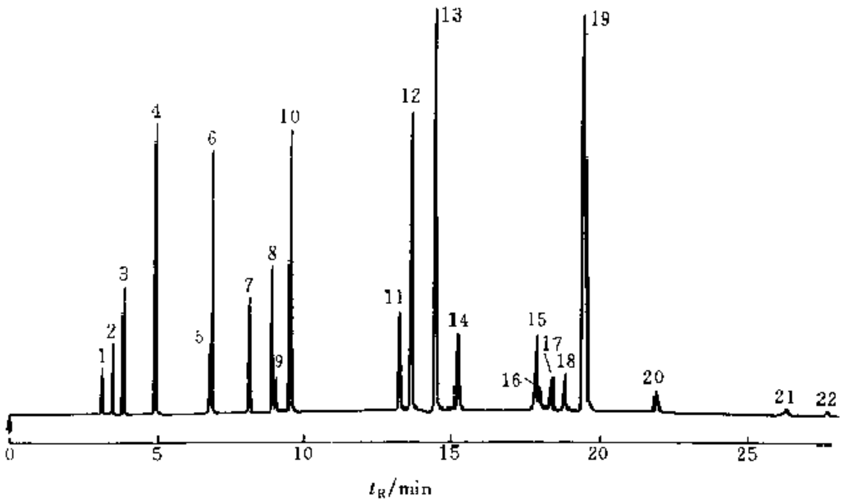


图 20-36 C_1～C_5 烃（二）[32]

色谱峰：1—甲烷；2—乙烷；3—乙烯；4—丙烷；5—环丙烷；6—丙烯；7—乙炔；8—异丁烷；9—丙二烯；10—正丁烷；11—反-2-丁烯；12—1-丁烯；13—异丁烯；14—顺-2-丁烯；15—异戊烷；16—1，2-丁二烯；17—丙炔；18—正戊烷；19—1，3-丁二烯；20—3-甲基-1-丁烯；21—乙烯基乙炔；22—乙基乙炔

色谱柱：Al_2O_3 PLOT 柱，50m×0.32mm

柱　温：70℃→200℃，3℃・min^{-1}

载　气：N_2，100kPa

检测器：FID

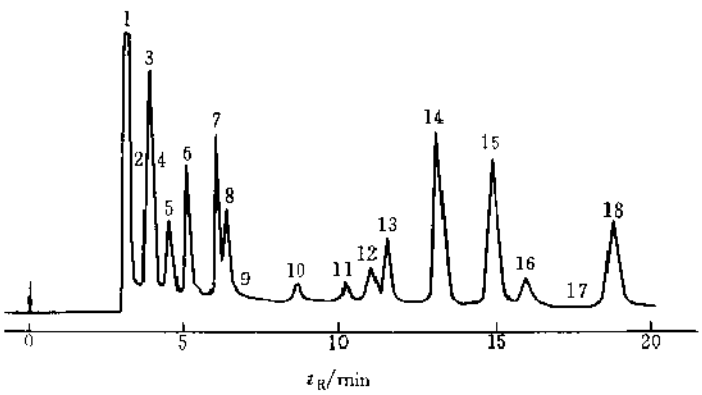


图 20-37 C_1～C_5 烃（三）

色谱峰：1—空气+CO；2—甲烷；3—乙烷；4—乙烯；5—CO_2；6—丙烷；7—丙烯；8—乙炔；9—异丁烷；10—正丁烷；11—丙二烯；12—异丁烷；13—1-丁烯；14—反-2-丁烯；15—顺-2-丁烯；16—甲基乙炔；17—正戊烷；18—丁二烯

色谱柱：17%癸二腈，Chromosorb P AW（70 目～80 目），9m×3mm

柱　温：室温

载　气：H_2，20ml・min^{-1}

检测器：TCD

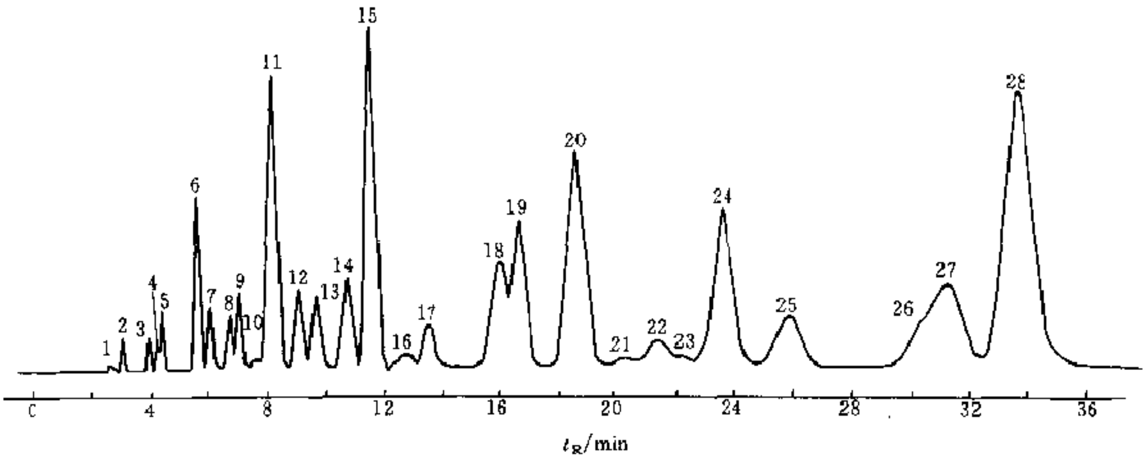


图 20-38 C_1～C_5 烃（四）[33]

色谱峰：1—甲烷；2—乙烷＋乙烯；3—丙烷；4—乙炔；5—丙烯；6—异丁烷；7—环丙烷；8—丙二烯；9—正丁烷；10—新戊烷；11—1-丁烯＋异丁烯；12—甲基乙炔；13—反-2-丁烯；14—顺-2-丁烯；15—1，3-丁二烯；16—异戊烷；17—3 甲基-1-丁烯；18—正戊烷；19—1，2-丁二烯；20—乙基乙炔；21—2-甲基-1-丁烯；22—1，4-丁二烯；23—反-2-戊烯；24—乙烯基乙炔；25—2-甲基-2-丁烯；26—2-甲基戊烷；27—异戊烯；28—二甲基乙炔

色谱柱：20%马来酸丁二酯，Chromosorb P（60 目～80 目），8.3m×3mm＋10%双（2-甲氧基乙氧基）乙基乙醚，Chromosorb P（60 目～80 目），5m×3mm

柱 温：25℃

载 气：He，35ml·min⁻¹

检测器：FID

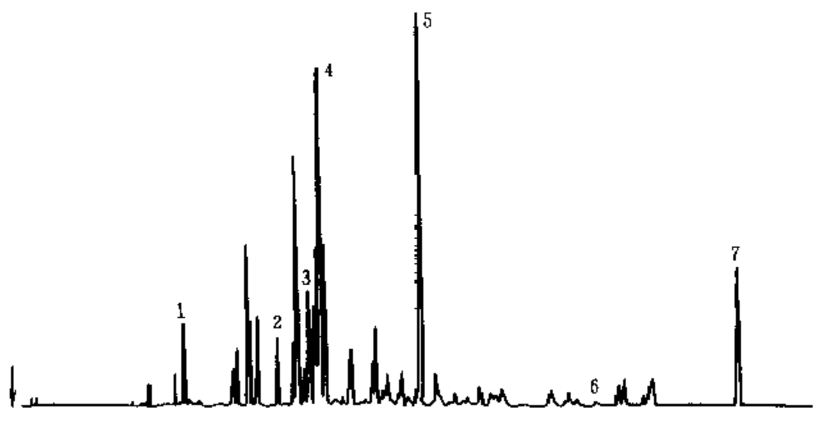


图 20-39 茚[34]

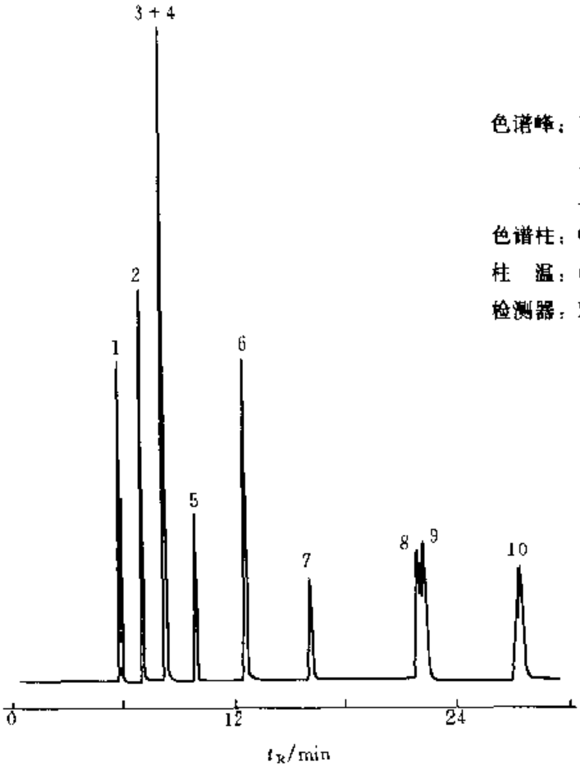
色谱峰：1—苯乙烯；2—α-甲基苯乙烯；3—二环戊二烯；4—乙烯基甲苯；5—茚；6—甲基茚；7—萘

色谱柱：CP—Sil 19 CB，d_f＝0.2μm，10m×0.1mm

柱 温：50℃→180℃，5℃·min^{-1}

载 气：H_2，320kPa

检测器：FID



色谱峰：1—正己烷；2—正庚烷；3—苯；4—甲基环己烷；5—正辛烷；6—甲苯；7—正壬烷；8—氯代苯；9—对二甲苯；10—邻二甲苯

色谱柱：OV-17，20m×0.08mm

柱　温：60℃

检测器：FID

图 20-40　C_6～C_9 烷烃与芳烃[35]

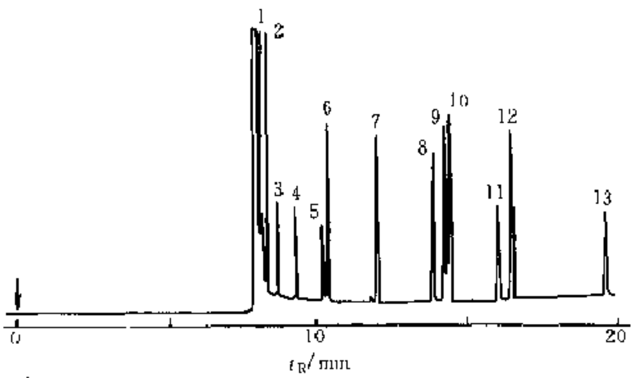


图 20-41　C_8～C_{12}烷烃与芳烃[36]

色谱峰：1—正辛烷；2—正壬烷；3—正癸烷；4—正十一烷；5—正十二烷；6—苯；7—甲苯；8—乙基苯；9—对二甲苯；10—间二甲苯；11—正丙基苯；12—邻二甲苯；13—正丁基苯

色谱柱：1，2，3-三（2-氰乙氧基）丙烷，50m×0.25mm

柱　温：95℃→120℃，2.5℃·min^{-1}

载　气：N_2，90kPa

检测器：FID

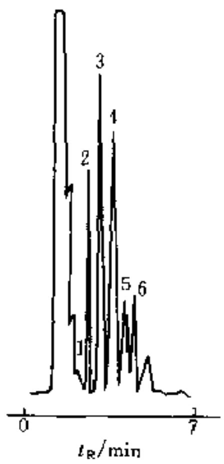


图 20-42　C_6～C_{13}烷烃与芳烃

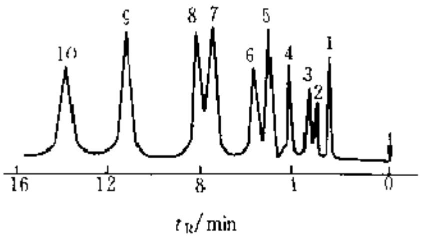
色谱峰：1—正十三烷；2—苯；3—甲苯；4—乙基苯＋对二甲苯＋异丙基苯；5—正丙基苯；6—邻二甲基苯

色谱柱：30% OV-275，Chromosorb P AW（80 目～100 目），3m×3mm

柱　温：150℃

载　气：N_2，16ml·min^{-1}

检测器：FID



色谱峰：1—正癸烷；2—苯；3—正十一烷；4—甲苯；5—正十二烷；6—乙基苯；7—正丙基苯；8—正十三烷；9—正丁基苯；10—正十四烷

色谱柱：聚乙二醇丁二酸酯、上海试剂厂 101 AW 担体（60 目～80 目），3m×4mm

柱　温：103 ℃

检测器：FID

图 20-43　C_6～C_{14}烷烃与芳烃[37]

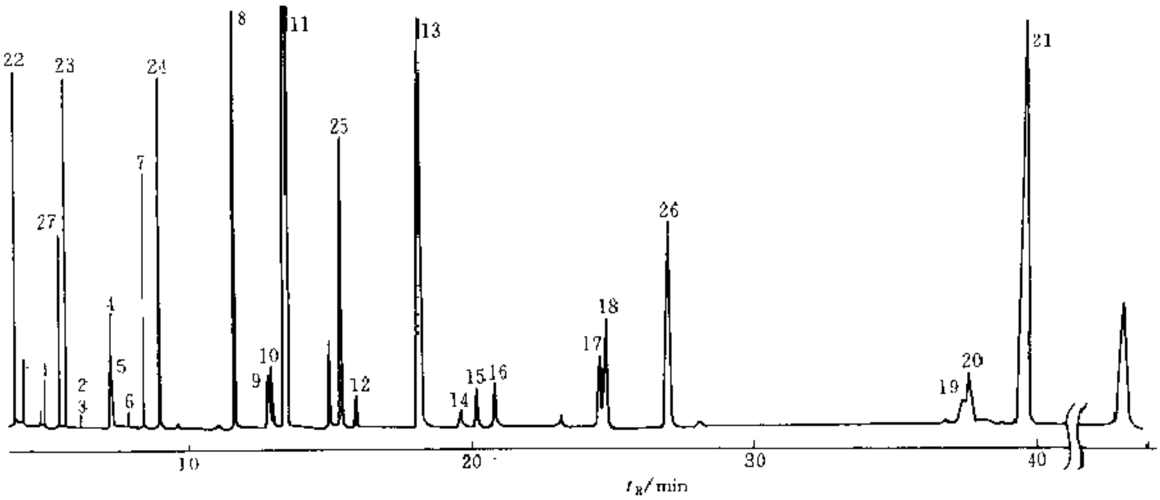


图 20-44　C_8～C_{13}烷烃与芳烃（一）[36]

色谱峰：1—1，3-二甲基苯+1，4-二甲基苯；2—1，2-二甲基苯；3—异丙基苯；4—1-甲基-3-乙基苯；5—1-甲基-4-乙基苯；6—1-甲基-2-乙基苯；7—1，2，4-三甲基苯；8—1，3-二甲基-5-乙基苯；9—1，4-二甲基-2-乙基苯；10—1，3-二甲基-4-乙基苯；11—1，2-二甲基-4-乙基苯；12—1，2，4，5-四甲基苯；13—1，3-二乙基-5-甲基苯；14—1，4-二乙基-2-甲基苯；15—1，3-二乙基-4-甲基苯；16—1，2-二乙基-4-甲基苯；17—1，3，5-三甲基-2-乙基苯；18—1，2，5-三甲基-3-乙基苯；19～21—二甲基二乙基苯；22—正辛烷；23—正壬烷；24—正癸烷；25—正十一烷；26—正十二烷；27—正十三烷

色谱柱：PONA 空心柱 50m×0.2mm，d_f=0.5μm　　载　气：H_2

柱　温：100 ℃　　检测器：FID

参　考　文　献

1　Gaspar G，Vidal-Madjar C，Guiochon G．Chromatographia，1982；15：125

2　北京分析仪器研究所元件组．分析仪器，1976：(3)：31

3　Mol H G J，Janssen H．G，Cramers C A，et al．HRC，1995：18：19

4　Kissin Y V，Feulmer G P．J Chrom Sci，1986：24：53

5　Hewlett-Packard．Application Note AN 228-31

6　Hewlett Packard．Application Note，AN 228-5

7　修正佳，李浩春，卢佩章．全国第二届毛细管色谱报告会文集，1984：144

8　Hewlett-Packard．Technical Paper，(NO．88)

9　Ottmers D M，Say G R，Rase H F．Anal Chem，1966；38：148

10　Duming R W．Chromatographia，1969；2：293

11 Meltyow W, Warwel S, Fell B. Chromatographia, 1973; 6: 183
12 李秀梅，董运宇，姚彩兰等. 第十次全国色谱学术报告会文集，1995; 83
13 Sidisky L M, Robillard M V, HRC, 1993; 16: 116
14 周良模. 气相色谱新技术. 北京：科学出版社，1994: 223
15 Tranchani J. Practical Mamual of Gas Chromatography. New York: Elsevier Pub, 1969: 223
16 许伟君. 第一次全国石油化工色谱学术报告文集，1984: 619
17 Stuckey C L. J Chrom Sci, 1969; 7: 177
18 Munai F, Trisciani A, Mapelli G, et al. HRC&CC, 1985; 8: 601
19 de Zeeuw J, de Nijs R CM. Chrompack News, 1983; 10 (1): 1
20 J&W Scientific. 1994-1995 Chromatography Catalog & Reference Guide, 1995: 211
21 Poole C F, Butler H T, Coddens M E, et al. J Chromatogr, 1984; 289: 299
22 Gary V N, Bhatt B D, Kaushik V K, et al. J Chrom Sci, 1987; 25: 237
23 Wright C W, Later D W, Wilson B W. HRC & CC, 1985; 8: 283
24 SGE. Analytical Products 1993/1994 Catalogue, 1994: 74
25 Onuska F J, Comba M E. J Chromatogr, 1976; 126: 133
26 Lame D A, Moe H K, Katz M. Anal Chem, 1973; 45: 1776
27 Buijten J, Blomberg L, Hoffman S, et al. J Chromatogr, 1984; 289: 143
28 Janssen F. Chromatographia, 1983; 17: 477
29 de Zeeuw J, de Nijs R C M, Henrich L T. J Chrom Sci, 1987: 25: 71
30 Henrich L H. J Chrom Sci, 1988; 26: 198
31 Supelco. Catalog 18: 19
32 de Nijs R C M, de Zeeum J. J Chromatogr, 1983: 279: 41
33 Carson J W, Young J D, Lege G. J Chrom Sci, 1972; 10: 739
34 Chrompack News, 1984; 11 (1): 4
35 Chien C. F, Ropecni M M, Laub R J. J Chrom Sci, 1984; 22: 1
36 de Zeeuw J, de Nijk R C M, Chrompack News, 1983; 10 (1): 1
37 孙亦粱，徐秉玖. 分析化学，1983; 11: 881
38 Matisova E, Kuran P. Chromaographia, 1990; 30: 328

（李浩春　李全洪）

第二十一章　石油产品色谱图

第一节　气体烃色谱图

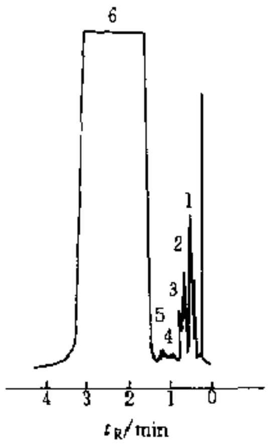


图 21-1　纯乙烯[1]

色谱峰：1—CH_4；2—H_2O；3—CO_2；4—NO；5—C_2H_2；6—C_2H_4

色谱柱：碳分子筛，0.50m×4mm　柱　温：130℃

载　气：H_2，9.8ml·s^{-1}　检测器：TCD

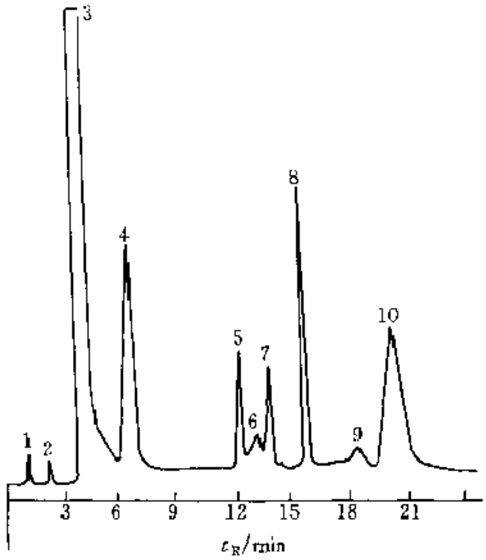


图 21-2　工业乙烯中杂质[2]

色谱峰：1—甲烷；2—乙烷；3—乙烯；4—丙烷；5—丙烯；6—异丁烷；7—正丁烷；8—乙炔；9—1-丁烯；10—异丁烯+1,3 丁二烯

色谱柱：γ-氧化铝（0.177mm～0.250mm），3m×2mm

柱　温：70℃（7min）→220℃（4min），10℃·nim^{-1}

载　气：N_2，27ml·min^{-1}

检测器：FID

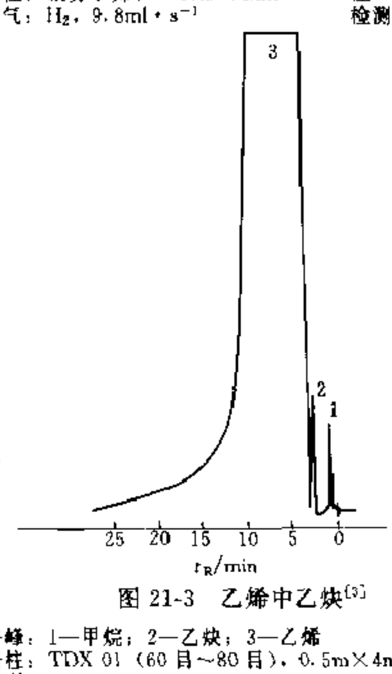


图 21-3　乙烯中乙炔[3]

色谱峰：1—甲烷；2—乙炔；3—乙烯

色谱柱：TDX 01（60 目～80 目），0.5m×4mm

柱　温：150℃

载　气：N_2，48ml·min^{-1}

检测器：FID

检测器温度：160℃

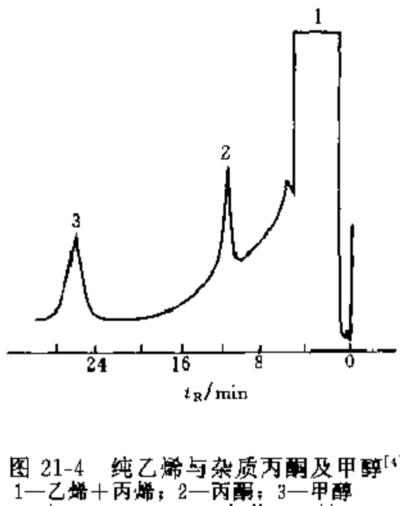


图 21-4　纯乙烯与杂质丙酮及甲醇[4]

色谱峰：1—乙烯+丙烯；2—丙酮；3—甲醇

色谱柱：20% PEG-1500，6201 担体（60 目～80 目），4m×4mm

柱　温：65℃

载　气：N_2，30ml·min^{-1}

检测器：FID

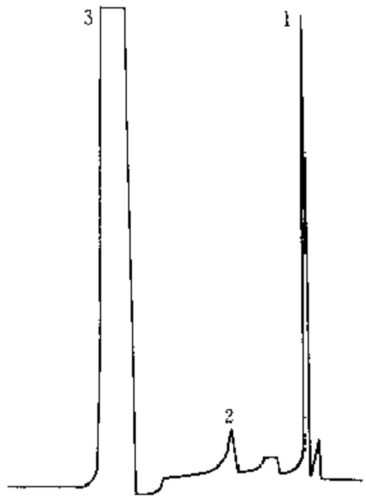


图 21-5 工业乙烯[5]

色谱峰：1—乙烯；2—甲醇；3—水

色谱柱：20% Carbowax 20M，上海试剂厂 101 担体（60 目～80 目），2m×3mm

柱 温：90℃

载 气：N_2，30ml·min^{-1}

检测器：TCD

气化室温度：150℃

检测器温度：150℃

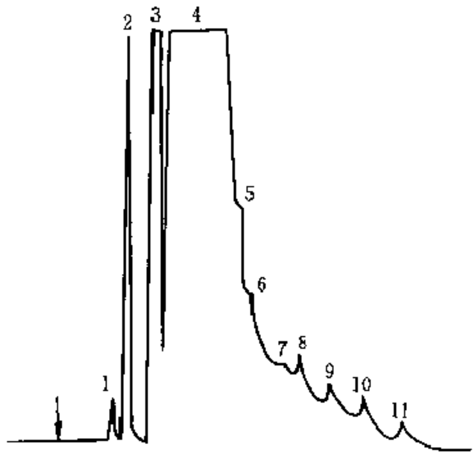


图 21-6 纯丙烯[6]

色谱峰：1—甲烷；2—乙烯＋乙烷；3—丙烷；4—丙烯；5—正丁烷；6—环丙烷；7—乙炔；8—丁烯；9 丙二烯；10—反-2-丁烯；11—顺-2-丁烯

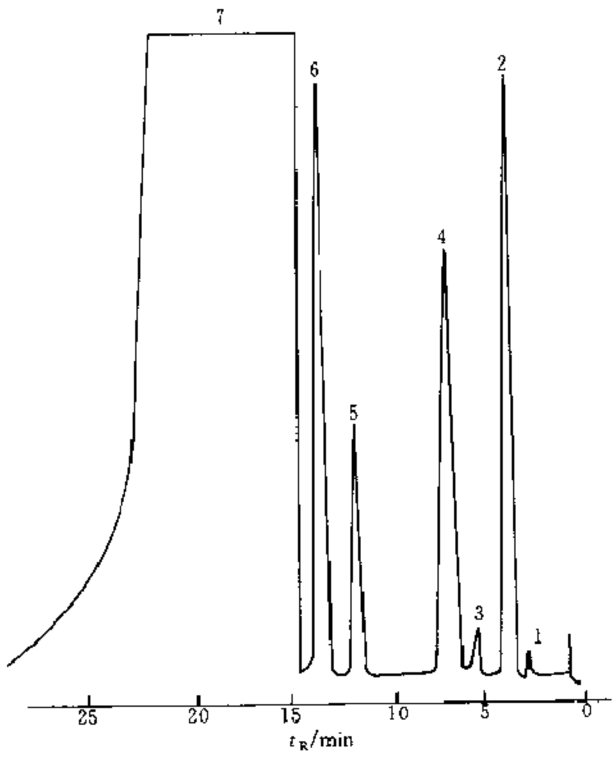
色谱柱：25% 2,4-二甲基噻吩，红色硅藻土（60 目～80 目），6m×3mm；

柱 温：0℃

载 气：N_2，40ml·min^{-1}

检测器：FID

检测器温度：100℃



色谱峰：1—甲烷；2—乙烷；3—乙烯；4—丙烷；5—乙炔；6—环丙烷；7—丙烯

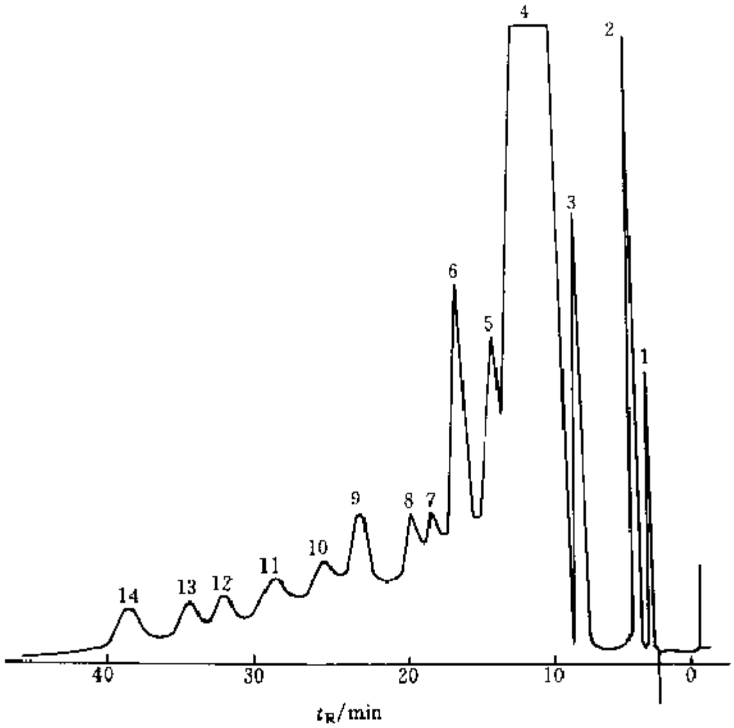
色谱柱：Porasil C（0.149mm～0.177mm），2m×3mm

柱 温：35℃

载 气：N_2，40ml·min^{-1}

检测器：FID

图 21-7 工业丙烯中杂质[7]



色谱峰：

1—甲烷；2—乙烷＋乙烯；3—丙烷；4—丙烯；5—异丁烷；6—环丙烷；7—丙二烯；8—正丁烷；9—异丁烯＋1-丁烯；10—丙炔；11—反-2-丁烯；12—顺-2-丁烯；13—1,3丁二烯；14—异戊烷

图 21-8　工业丙烯中杂质[7]

色谱柱：30%马来酸二正丁酯，Chromosorb P AW（0.177mm～0.250mm），6m×2mm 与 30%邻苯二甲酸二乙酯、Chromosorb P AW（0.177mm～0.250mm），3m×2mm 串联

柱　温：35°C

载　气：N_2，20ml・min^{-1}

检测器：FID

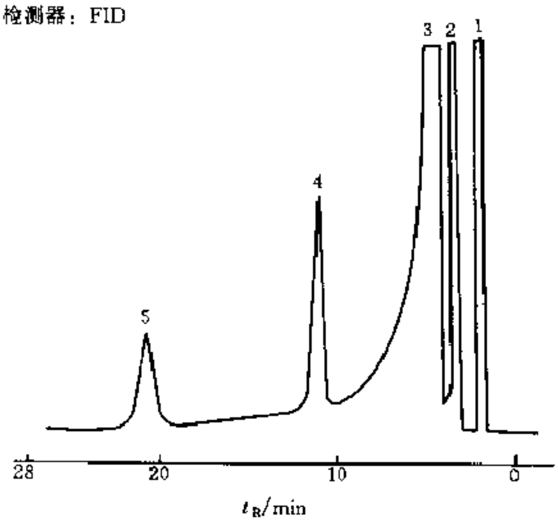


图 21-9　丙烯中痕量杂质[8]

色谱峰：1—乙烷＋乙烯；2—丙烷；3—丙烯；4—丙二烯；5—丙炔

色谱柱：40% 丁二酸二丁酯，6201 担体（40 目～60 目），5m×5mm

柱　温：0℃

载　气：H_2，55ml・min^{-1}

检测器：FID

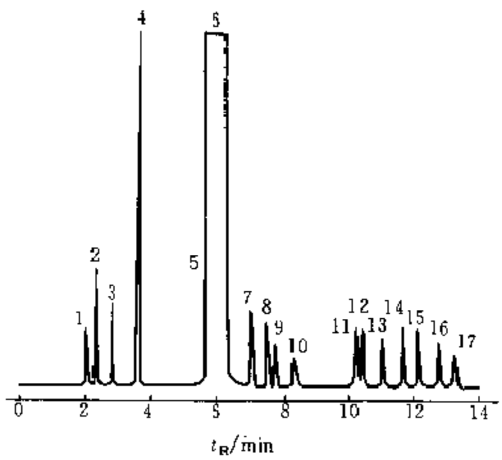


图 21-10　粗丙烯[9]

色谱峰：1—甲烷；2—乙烷；3—乙烯；4—丙烷；5—环丙烷；6—丙烯；7—异丁烷；8—正丁烷；9—丙二烯；10—乙炔；11—反-2-丁烯；12—1-丁烯；13—顺-2-丁烯；14—异戊烷；15—正戊烷；16—1,3-丁二烯；17—丙炔

色谱柱：Rt-Alumina，50m×0.53mm，d_f=3.0μm

柱　温：40℃（3min）→120℃（5min），10℃・min^{-1}

载　气：He，$\bar{u}$=37.5cm・s^{-1}（80℃）

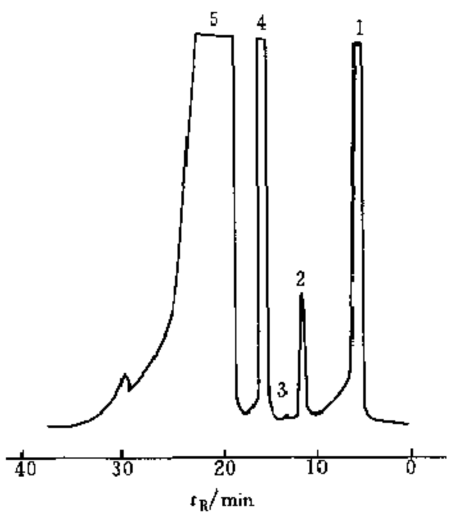


图 21-11　丙烯中痕量丙二烯[8]

色谱峰：1—乙烷＋丙烷；2—丙二烯；3—反-2-丁烯；4—乙烯；5—丙烯

色谱柱：17g 硝酸银溶于 20ml 乙二醇（低于 50℃ 加热），加入 68g 6201 担体（60 目～80 目），3.5m×5mm

柱　温：0℃

载　气：N_2，35ml·min^{-1}

检测器：FID

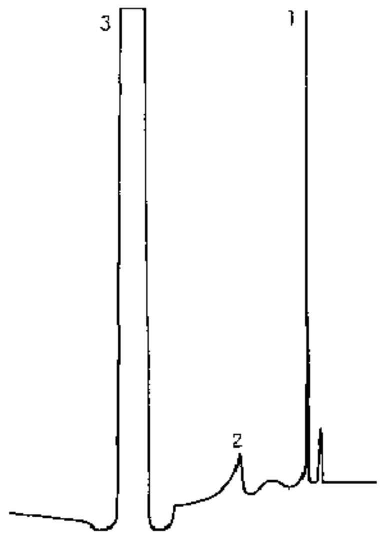


图 21-12　工业丙烯[10]

色谱峰：1—丙烯；2—甲醇；3—水

色谱柱：20% Carbowax 20M，上海试剂厂 101 担体（60 目～80 目），2m×3mm

柱　温：90℃

载　气：N_2，30ml·min^{-1}

检测器：TCD

气化室温度：150℃

检测器温度：150℃

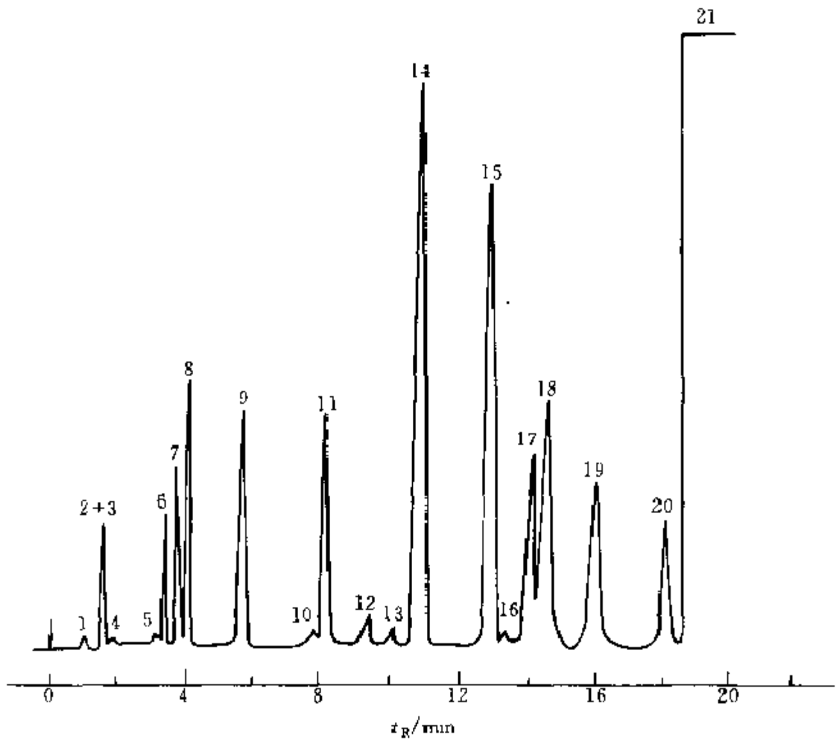


图 21-13　纯 1,3-丁二烯[11]

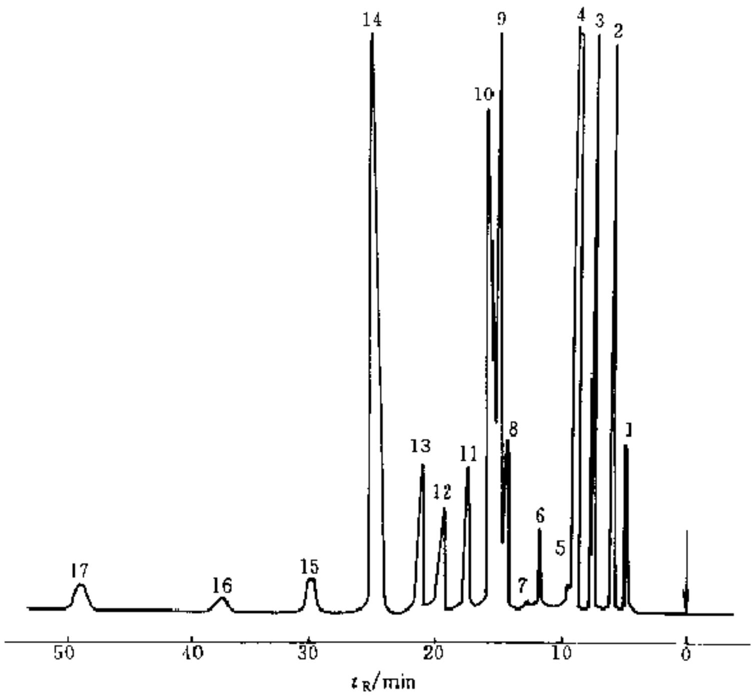
色谱峰：1—甲烷；2—乙烷；3—乙烯；4—乙炔；5—环丙烷；6—丙烷；7—丙烯；8—丙二烯；9—丙炔；10—未知物；11—异丁烷；12—新戊烷；13—正丁烷；14—1-丁烯；15—异丁烯；16—1,2-丁二烯；17—顺-2 丁烯；18—反-2-丁烯；19—丁炔；20—1 丁烯-3-炔；21—1、3-丁二烯；

色谱柱：4.94%苦味酸，Carbopack B，5m×1.5mm

柱　温：46℃

载　气：H_2

检测器：FID



色谱峰：1—甲烷；2—乙烷＋乙烯；3—丙烷；4—丙烯；5—乙炔＋异丁烷；6—正丁烷；7—环丙烷；8—丙二烯；9—1-丁烯；10—异丁烯；11—反-2-丁烯；12—顺-2-丁烯；13—丙炔；14—1，3-丁二烯；15—1，2-丁二烯；16—1-丁炔；17—乙烯基乙炔

色谱柱：癸二腈-C-22 耐火砖（60 目～80 目）质量比为 20：80，9m×4mm

柱　温：50℃

载　气：N_2，30ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：110℃

检测器温度：110℃

图 21-14　丁二烯中杂质[12]

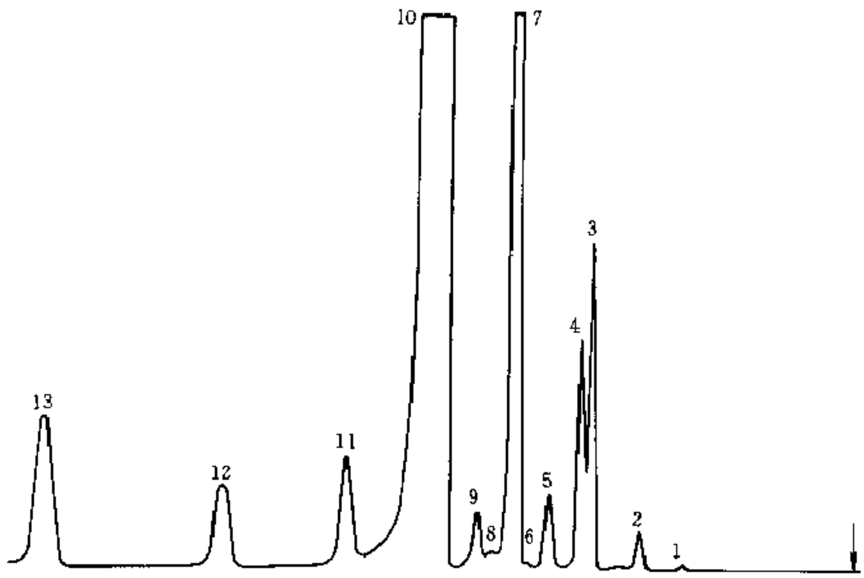


图 21-15　工业丁二烯中杂质[12]

色谱峰：1—异丁烷；2—正丁烷；3—1-丁烯；4—异丁烯；5—反-2-丁烯；6—异戊烷；7—顺-2-丁烯；8—丙炔；9—3-甲基-1-丁烯；10—1，3-丁二烯；11—1，2-丁二烯；12—1-丁炔；13—乙烯基乙炔

色谱柱：癸二腈＋C-22 耐火砖（60 目～80 目）质量比为 20：80，9m×4mm

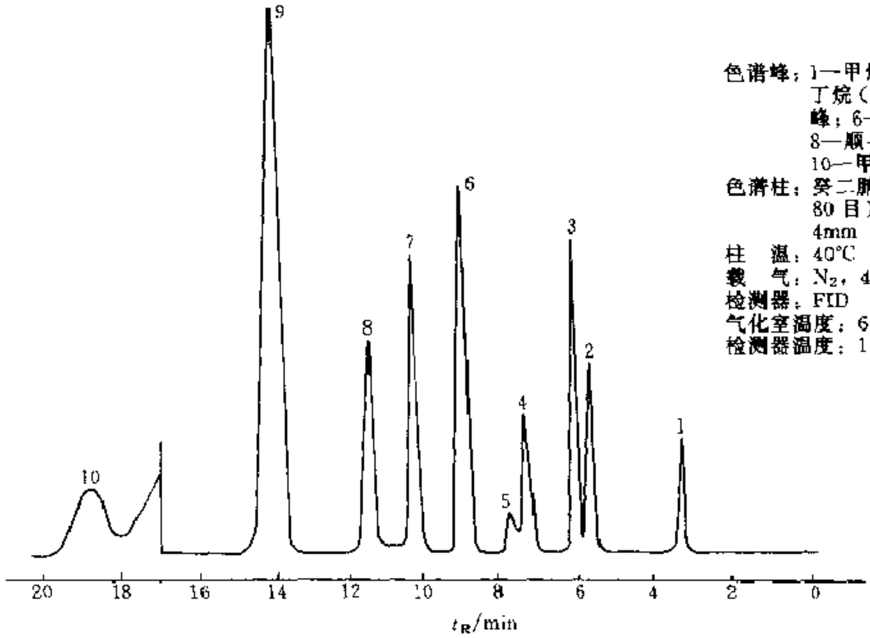
柱　温：50℃

载　气：N_2，30ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：110℃

检测器温度：110℃



色谱峰：1—甲烷（配入）；2—丙烯；3—异丁烷（配入）；4—正丁烷；5—未知峰；6—正异丁烯；7—反-2-丁烯；8—顺-2-丁烯；9—1,3-丁二烯；10—甲乙醚

色谱柱：癸二腈+6201釉化担体（60目～80目）质量比为25：75，7m×4mm

柱　温：40℃

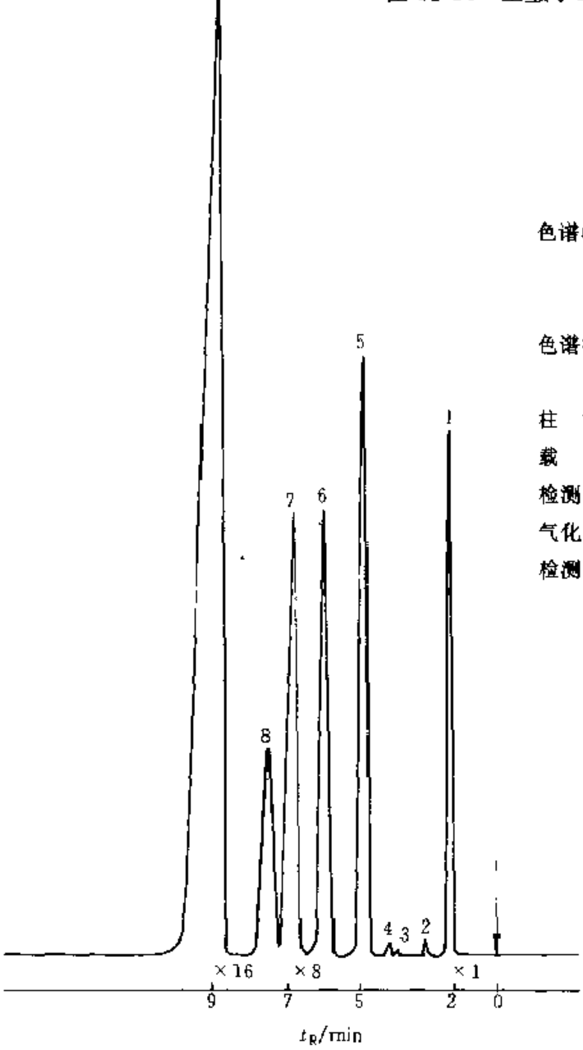
载　气：N_2，42ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：60℃

检测器温度：110℃

图 21-16　工业丁二烯[13]



色谱峰：1—空气+甲烷；2—丙烷；3—丙烯；4—异丁烷；5—正丁烷；6—1-丁烯+异丁烯；7—反-2-丁烯；8—顺-2-丁烯；9—1,3-丁二烯

色谱柱：癸二腈+C-22耐火砖（60目～80目）质量比为20：80，6m×3mm

柱　温：40℃

载　气：H_2，20ml·min^{-1}

检测器：TCD

气化室温度：40℃

检测器温度：40℃

图 21-17　工业丁二烯[14]

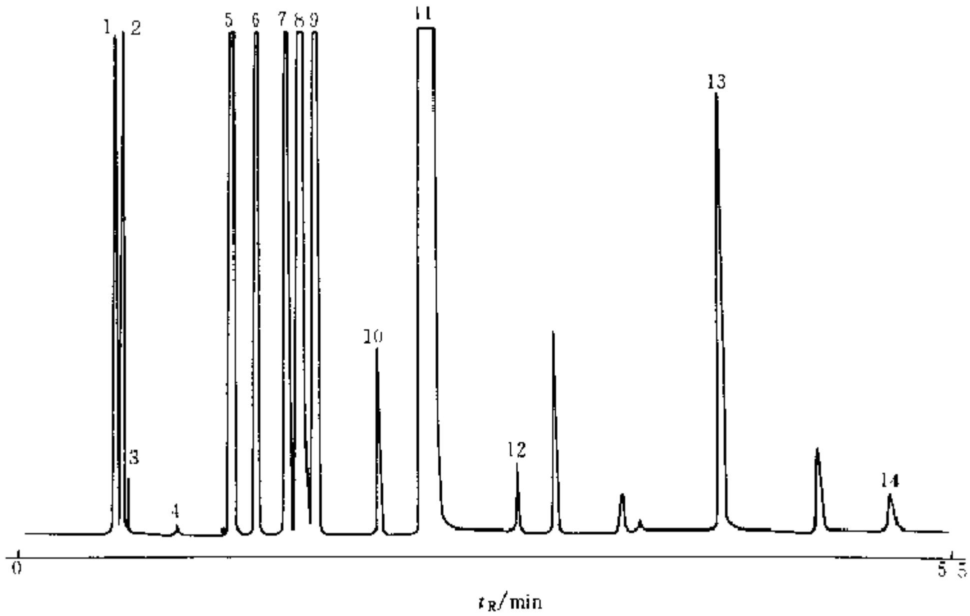


图 21-18　粗 1、3-丁二烯[15]

色谱峰：1—异丁烷；2—正丁烷；3—乙炔；4—甲基环丙烷；5—反-2-丁烯；6—1-丁烯；7—异丁烯；8—顺-2-丁烯；9—异戊烷；10—1,2-丁二烯；11—1,3-丁二烯；12—丙炔；13—乙烯基乙炔；14—丁炔

色谱柱：GS-Alumina，30m×0.53mm

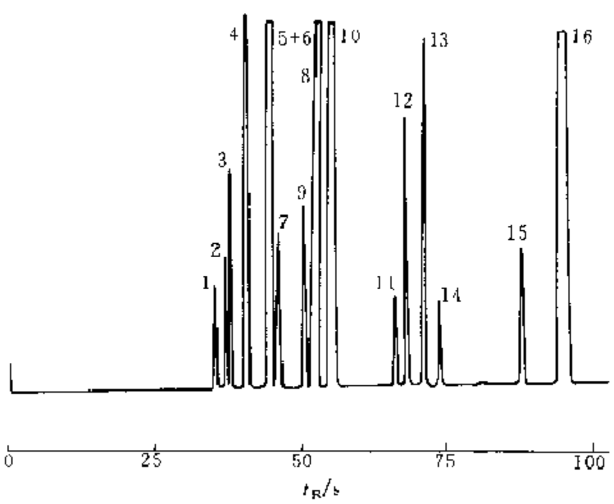
柱　温：95℃（5min）→130℃（10min），5℃·min^{-1}

载　气：He，$\bar{u}$=51cm·s^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：250℃



色谱峰：1—甲烷；2—乙烷；3—乙烯；4—丙烷；5—环丙烷；6—丙烯；7—乙炔；8—异丁烷；9—丙二烯；10—正丁烷；11—反-2-丁烯；12—1-丁烯；13—异丁烯；14—顺-2-丁烯；15—丙炔；16—1,3-丁二烯；

色谱柱：Al_2O_3 PLOT 柱，50m×0.32mm

柱　温：100℃

载　气：H_2，300kPa

检测器：FID

图 21-19　C_1～C_4 烃[16]

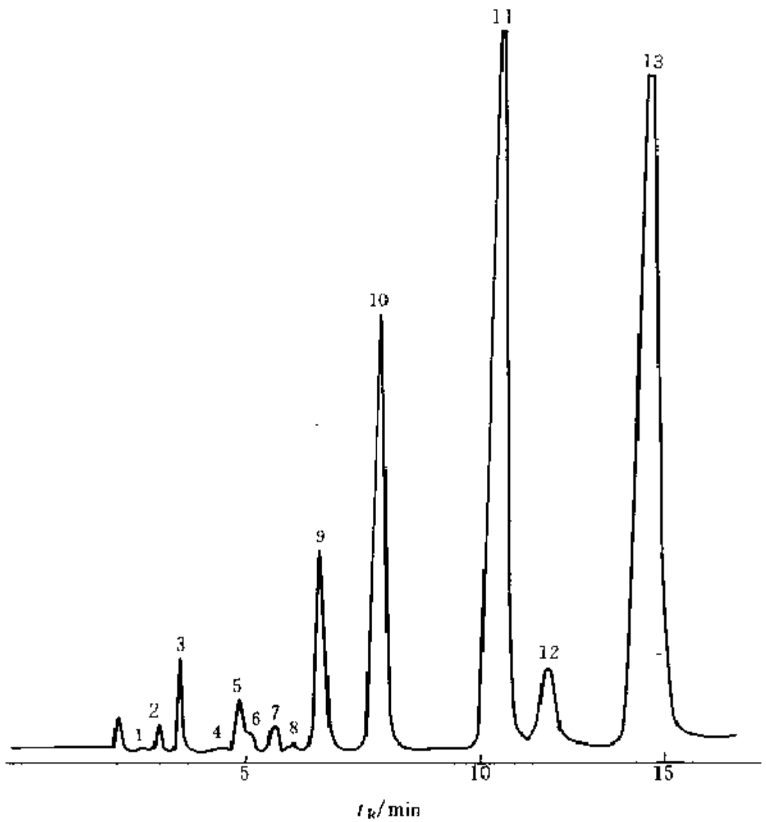


图 21-20 工业用裂解 C_4 馏分（一）[17]

色谱峰：1—丙烷；2—异丁烷；3—正丁烷；4—乙烯；5—丙烯；6—异戊烷；7—丙二烯；8—正戊烷；9—反-2-丁烯；10—异丁烯；11—1-丁烯；12—顺-2-丁烯；13—1,3-丁二烯

色谱柱：$AgNO_3$＋二缩三乙二醇＋6201 担体（60 目～80 目）质量比为 2.4：1.5：30；1m×3mm 与 $AgNO_3$＋苯乙腈＋6201 担体（60 目～80 目）质量比为 15：30：100；6m×3mm 串联

柱　温：0℃→35℃

载　气：H_2，22ml・min^{-1}

检测器：TCD

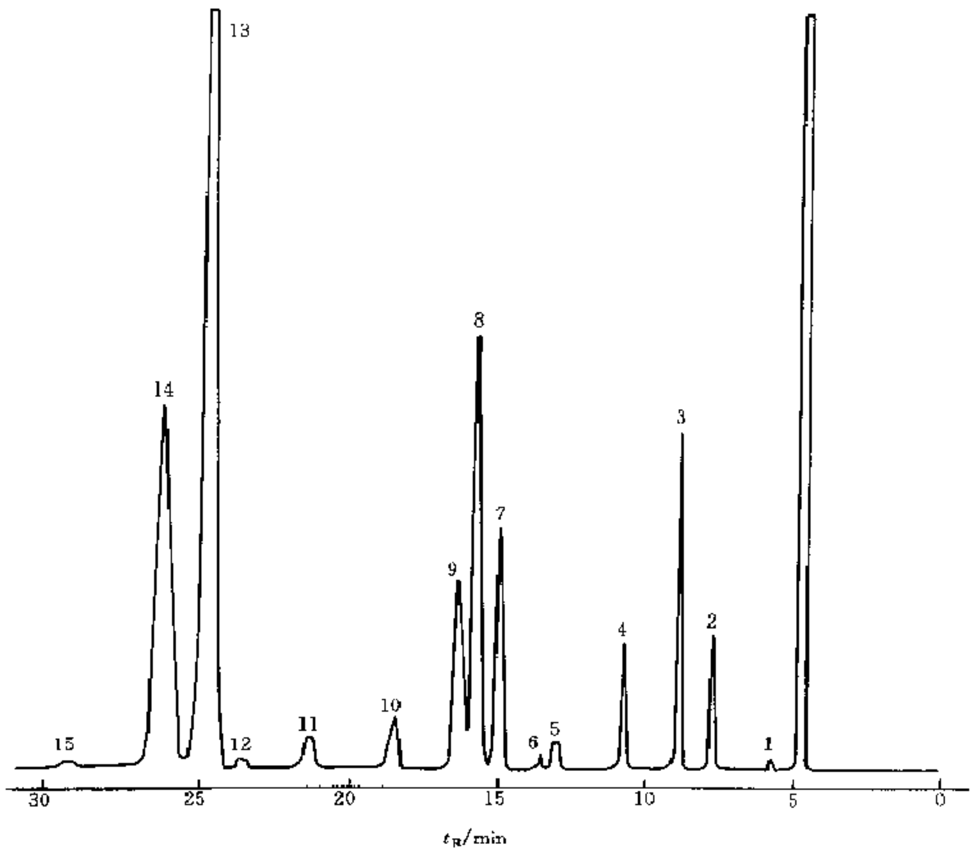


图 21-21 工业用裂解 C_4 馏分（二）[17]

色谱峰：1—乙烷＋乙烯；2—丙烷；3—丙烯；4—异丁烷；5—正丁烷；6—环丙烷；7—丙二烯；8—1-丁烯；9—异丁烯；10—反-2-丁烯；11—顺-2-丁烯；12—异戊烷；13—1,3-丁二烯；14—丙炔；15—正戊烷

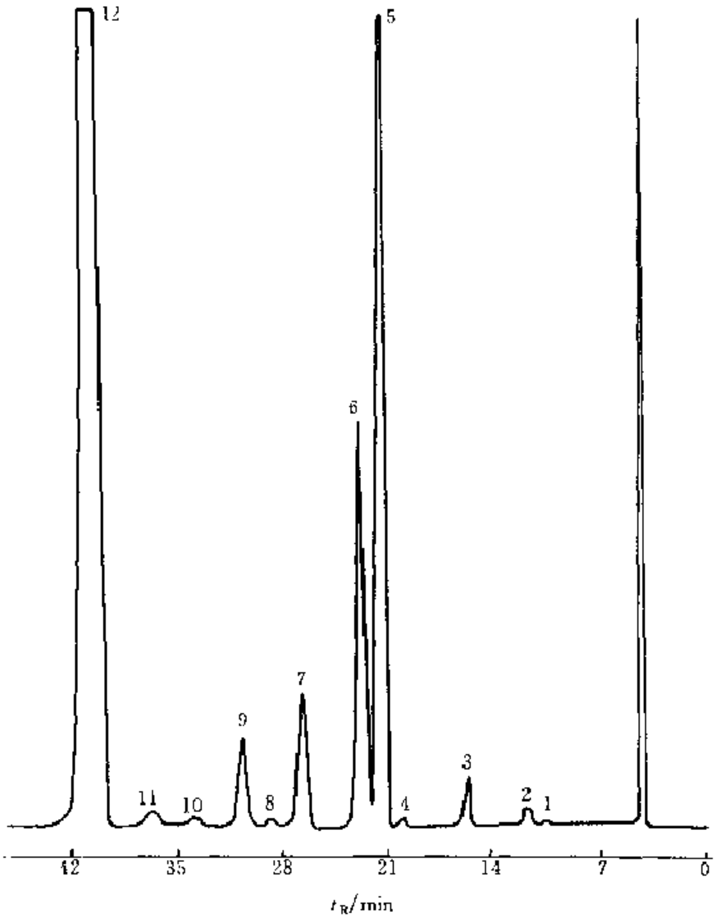
色谱柱：25%（82.5%碳酸丙烯酯＋17.5% DC-200），Chromosorb P（60 目～80 目）；14m×3mm

柱　温：0℃→35℃

载　气：H_2，20ml・min^{-1}

检测器：TCD

气化室温度：70℃



色谱峰：1—丙烯；2—异丁烷；3—正丁烷；4—丙二烯；5—1-丁烯；6—异丁烯；7—反-2-丁烯；8—异戊烷；9—顺-2-丁烯；10—丙炔；11—正戊烷；12—1,3-丁二烯

色谱柱：30% 癸二腈，Chromosorb P（60 目～80 目），10m×3mm

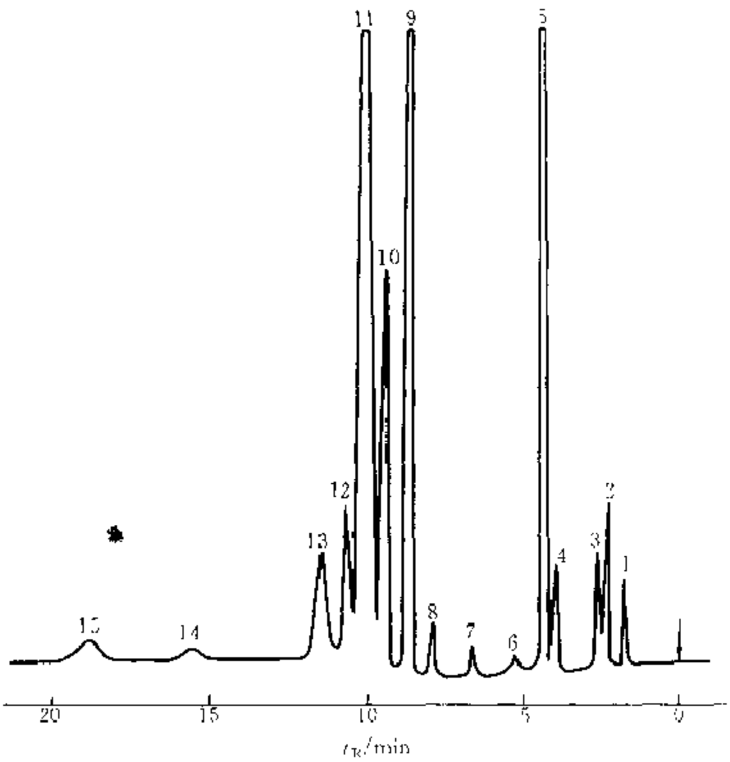
柱　温：0℃→40℃

载　气：H_2，21.4ml·min^{-1}

检测器：TCD

气化室温度：70℃

图 21-22　工业用裂解 C_4 馏分（三）[17]



色谱峰：1—甲烷；2—乙烯；3—乙烷；4—丙烷；5—丙烯；6—丙炔；7—异丁烷；8—正丁烷；9—正丁烯；10—异丁烯；11—1,3-丁二烯；12—反-2-丁烯；13—顺-2-丁烯；14—异戊烷；15—正戊烷；

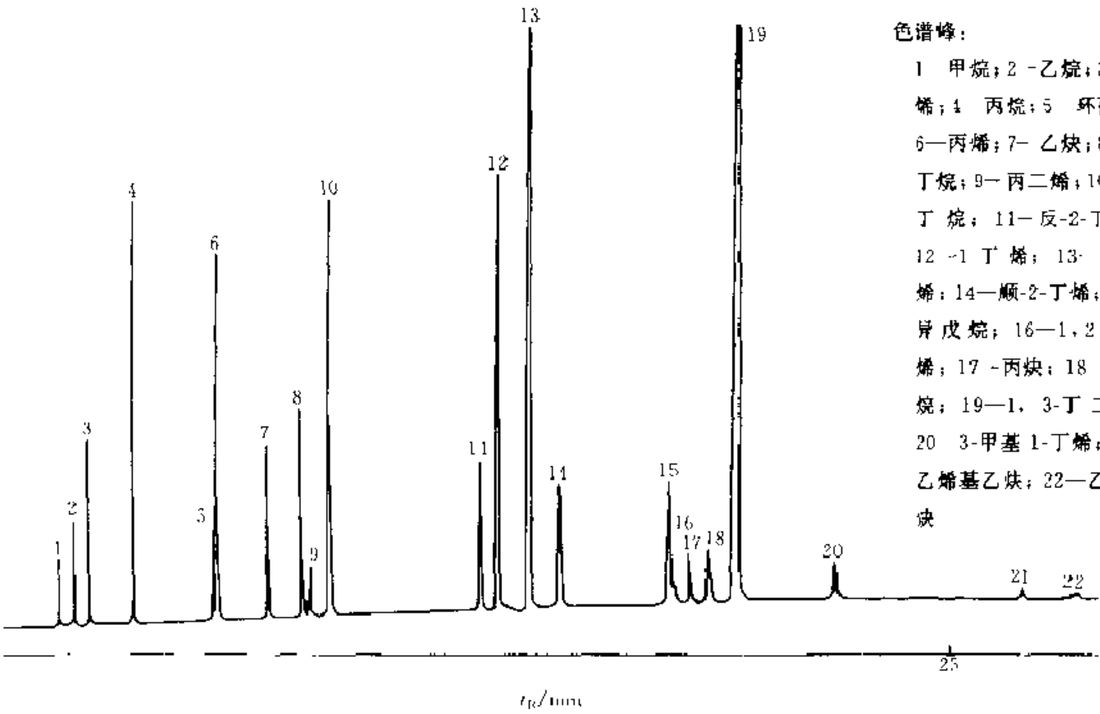
色谱柱：HDG-202（80 目～100 目），5m×2mm

柱　温：50℃

载　气：N_2，10.7ml·min^{-1}

检测器：FID

图 21-23　C_1～C_5 烃（一）



色谱峰：

1—甲烷；2—乙烷；3—乙烯；4—丙烷；5—环丙烷；6—丙烯；7—乙炔；8—异丁烷；9—丙二烯；10—正丁烷；11—反-2-丁烯；12—1-丁烯；13—异丁烯；14—顺-2-丁烯；15—异戊烷；16—1，2-丁二烯；17—丙炔；18—正戊烷；19—1，3-丁二烯；20—3-甲基-1-丁烯；21—乙烯基乙炔；22—乙基乙炔

图 21-24 C_1～C_5 烃（一）[19]

色谱柱：Al_2O_3/KCl PLOT 柱，50m×0.32mm，d_f=5.0μm　　载　气：N_2，$\bar{u}$=26cm・s^{-1}　　气化室温度：250℃

柱　温：70℃→200℃，3℃・min^{-1}　　检测器：FID　　检测器温度：250℃

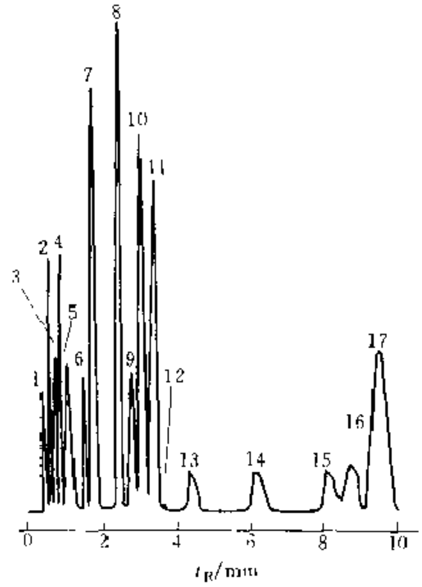


图 21-25 C_1～C_5 烃（三）[20]

色谱峰：1—甲烷；2—乙烷+乙烯；3—丙炔；4—丙烷；5—丙烯；6—异丁烷；7—正丁烷；8—1-丁烯；9—异丁烯；10—反-2-丁烯；11—顺-2-丁烯；12—异戊烷；13—正戊烷；14—1-戊烯；15—反-2-戊烯；16—顺-2-戊烯；17—2-甲基戊烷

色谱柱：正辛烷/Porasil C（80 目～100 目），1.53m×3.3mm

柱　温：25℃

载　气：N_2，25ml・min^{-1}　　检测器：FID

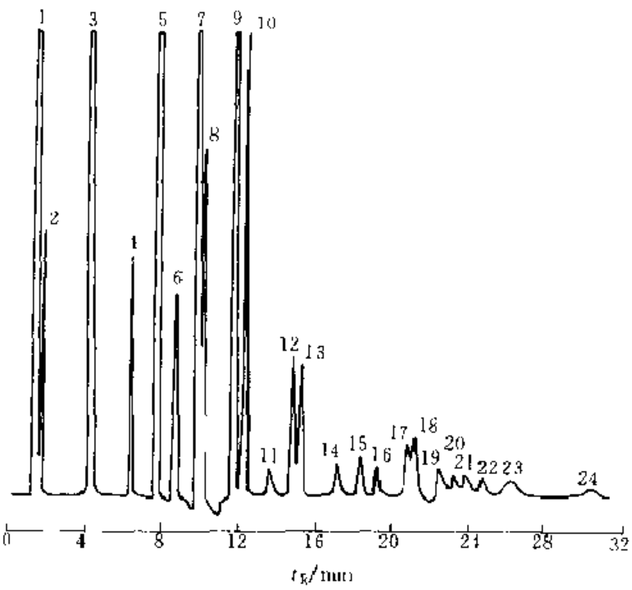


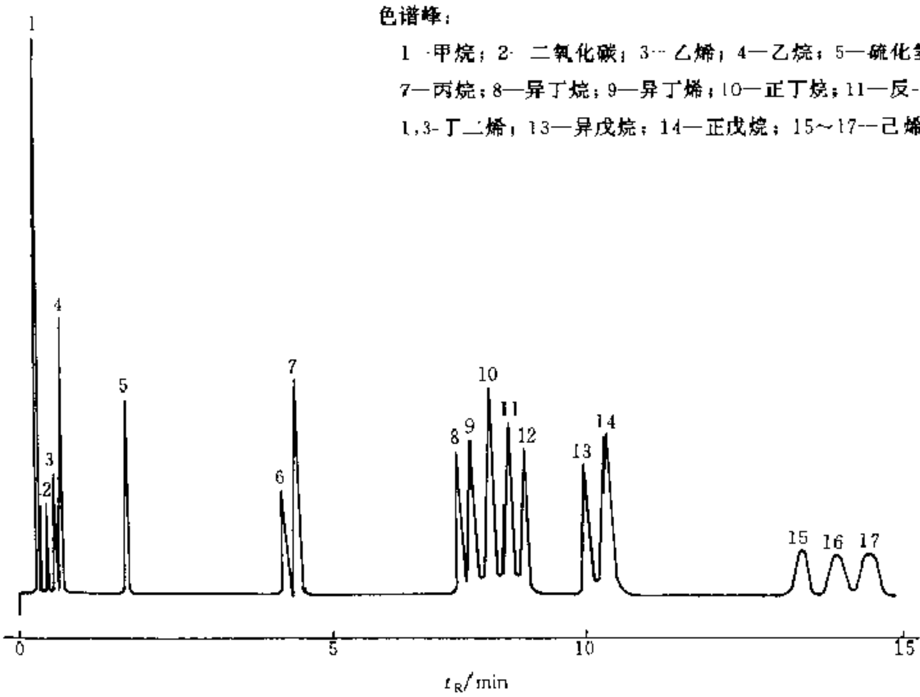
图 21-26 天然气（一）

色谱峰：1—氮气；2—氧气；3—甲烷；4—二氧化碳；5—乙烷；6—硫化氢；7—丙烷；8—水；9—异丁烷；10—正丁烷；11—新戊烷；12—异戊烷；13—正戊烷；14—2,2-二甲基丁烷；15—正己烷；16—环己烷；17—3-甲基己烷；18—正庚烷；19—2,2,4-三甲基戊烷；20—2,4-二甲基己烷；21—2,3,4-三甲基己烷；22—正辛烷；23—2,2,5-三甲基己烷；24—正壬烷

色谱柱：Porapak R（80 目～100 目），3.66m×3mm

柱　温：50℃（2min）→130℃，25℃・min^{-1}→225℃，8℃・min^{-1}

载　气：He　　检测器：TCD，FID

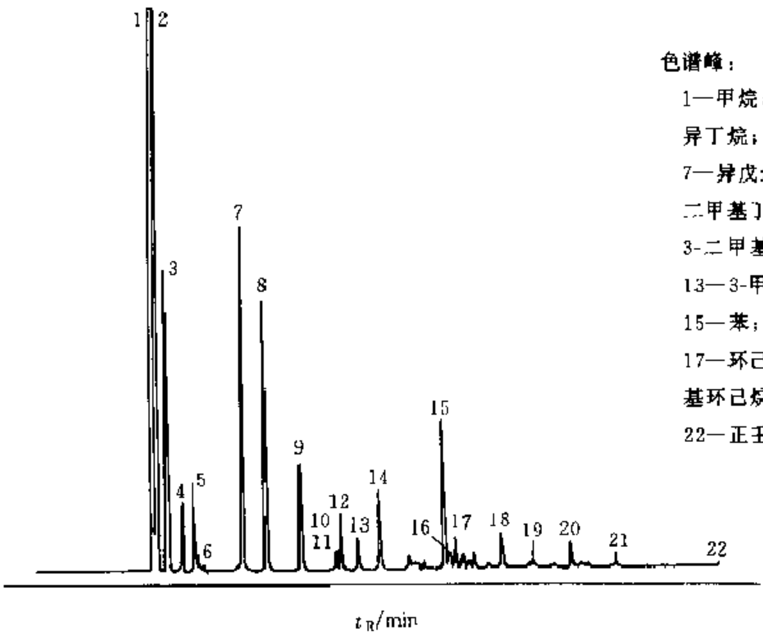


色谱峰：

1—甲烷；2—二氧化碳；3—乙烯；4—乙烷；5—硫化氢；6—丙烯；7—丙烷；8—异丁烷；9—异丁烯；10—正丁烷；11—反-2-丁烯；12—1,3-丁二烯；13—异戊烷；14—正戊烷；15～17—己烯异构物

图 21-27　天然气（二）[22]

色谱柱：Chromosorb 102（90μm～100μm），15m×0.42mm	检测器：TCD
柱　温：50℃（5min）→110℃，20℃·min^{-1}	气化室温度：150℃
载　气：He	检测器温度：150℃

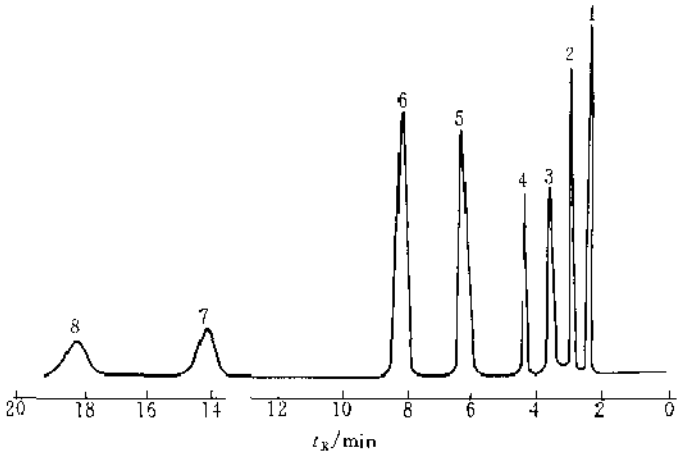


色谱峰：

1—甲烷；2—乙烷；3—丙烷；4—异丁烷；5—正丁烷；6—新戊烷；7—异戊烷；8—正戊烷；9—2，2-二甲基丁烷；10—环戊烷；11—2，3-二甲基丁烷；12—2-甲基戊烷；13—3-甲基戊烷；14—正己烷；15—苯；16—3，3-二甲基戊烷；17—环己烷；18—正庚烷；19—甲基环己烷；20—甲苯；21—正辛烷；22—正壬烷

图 21-28　天然气（三）[25]

色谱柱：CP-Sil 5 CB，50m×0.32mm	载　气：He，82kPa
柱　温：30.5℃（5min）→180℃，8℃·min^{-1}	检测器：FID

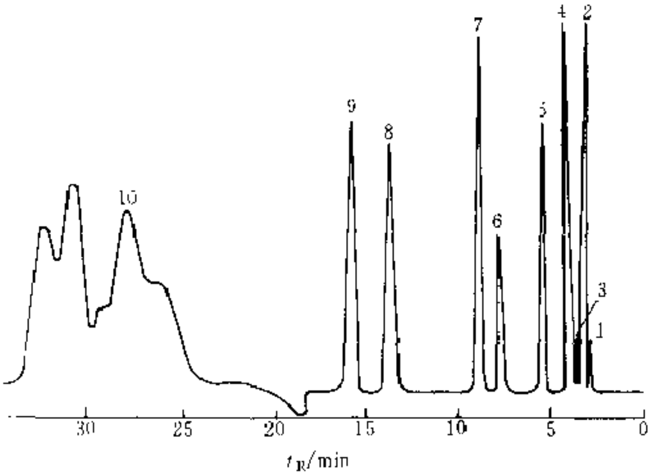


色谱峰：1—甲烷＋空气；2—乙烷；3—二氧化碳；4—丙烷；5—异丁烷；6—正丁烷；7—异戊烷；8—正戊烷

色谱柱：DIDP，3m＋DMS，6m

载　气：He，75ml·min^{-1}

图 21-29　天然气（四）[24]



色谱峰：1—空气；2—甲烷；3—二氧化碳；4—乙烷；5—丙烷；6—异丁烷；7—正丁烷；8—异戊烷；9—正戊烷；10—己烷及更重组分

色谱柱：Silicone 200，Chromosorb P AW，10m

载　气：He，40ml·min^{-1}

图 21-30　天然气（五）[24]

色谱峰：1—空气＋甲烷；2—乙烷；3—二氧化碳；4—丙烷；5—异丁烷；6—正丁烷；7—异戊烷；8—正戊烷；9—己烷；10—庚烷及更重组分

色谱柱：25% BMEE，Chromosorb P，7m

柱　温：25℃

载　气：He，40ml·min^{-1}

检测器：TCD

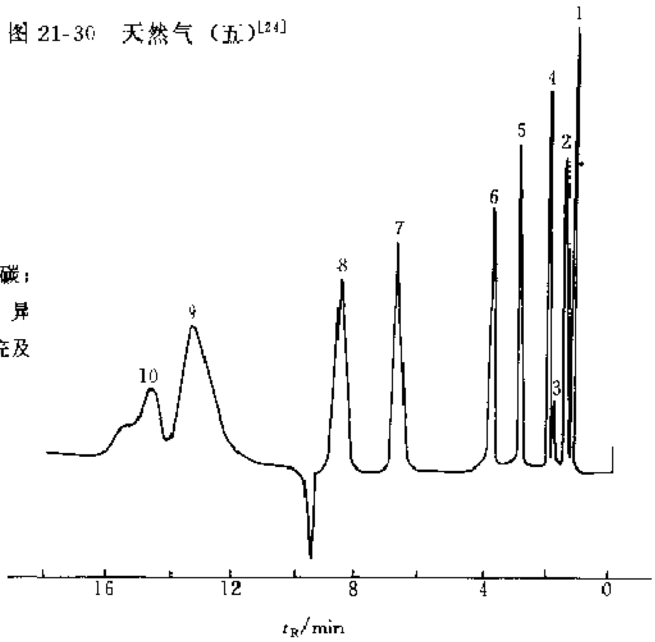


图 21-31　天然气（六）[24]

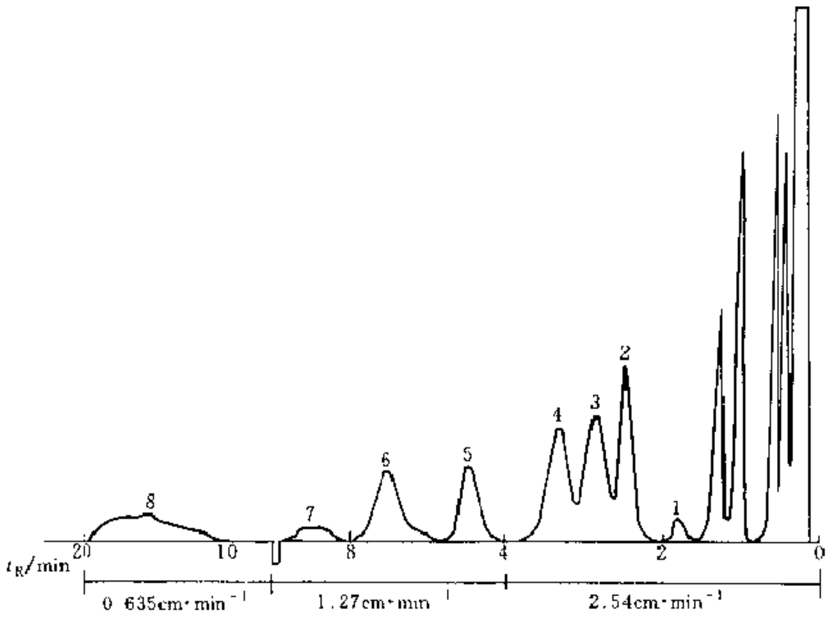


图 21-32 天然气（七）[24]

色谱峰：1—2,2-二甲基丁烷；2—2-甲基戊烷和2,3-二甲基丁烷；3—3-甲基戊烷；4—正己烷；5—甲基环戊烷；6—环己烷，3-甲基己烷和2-甲基己烷；7—正庚烷；8—辛烷及更重组分

色谱柱：双-2（2-甲氧基乙氧基）乙基醚，5m 填充柱

柱 温：30°C

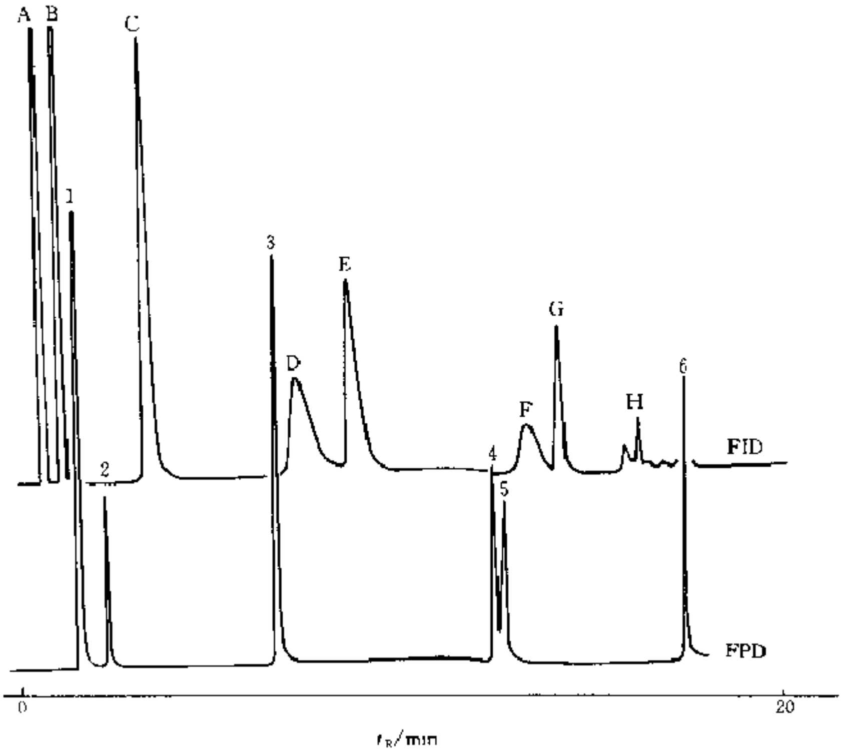


图 21-33 天然气（八）[25]

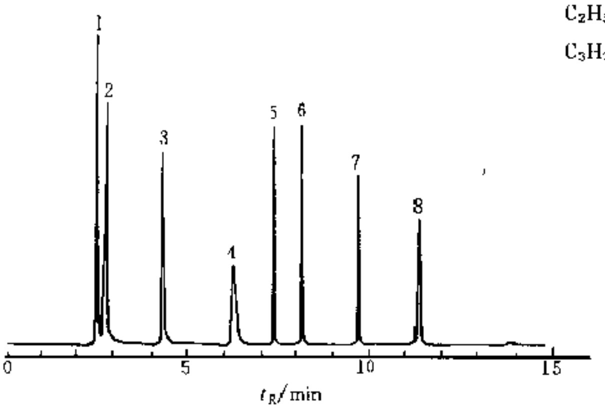
色谱峰：1—硫化氢；2—氧硫化碳；3—甲硫醇；4—二硫化碳；5—二甲硫；6—二甲二硫；A—甲烷；B—乙烷；C—丙烷；D—异丁烷；E—正丁烷；F—异戊烷；G—正戊烷；H—己烷

色谱柱：GS-Q，30m×0.53mm

柱 温：60°C（1min）→130°C，5°C·min⁻¹→240°C，30°C·min⁻¹

检测器：FPD，FID

检测器温度：300°C



色谱峰：1—H_2S；2—COS；3—CH_3SH；4—C_2H_5SH；5—i-C_3H_7SH；6 n-C_3H_7SH；7—C_4H_9SH；8—THT

图 21-34　天然气中微量硫化物[26]

色谱柱：SPB 1 Sulfur，30m×0.32mm，d_f=4μm

检测器：FID-SCD

柱　温：30℃（5min）→150℃，20℃·min^{-1}

气化室温度：−75℃→180℃，12℃·s^{-1}

载　气：He，不分流时间2min

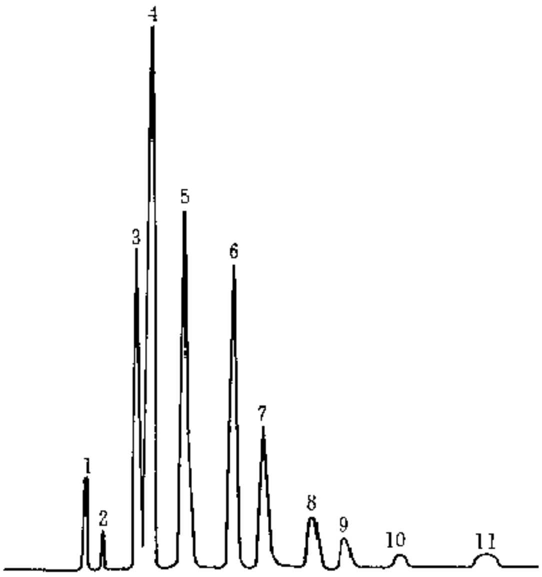


图 21-35　液化石油气气态烃（一）[27]

色谱峰：1—空气+甲烷；2—乙烷+乙烯；3—丙烷；4—丙烯；5—异丁烷；6—正丁烷；7—正丁烯+异丁烯；8—反-2-丁烯；9—顺-2-丁烯；10—异戊烷；11—正戊烷

色谱柱：26%（95%邻苯二甲酸二丁酯+5%β，β′-氧二丙腈），6201 担体（60 目~80 目）10m×3mm

柱　温：25℃

载　气：H_2，40ml·min^{-1}

检测器：TCD

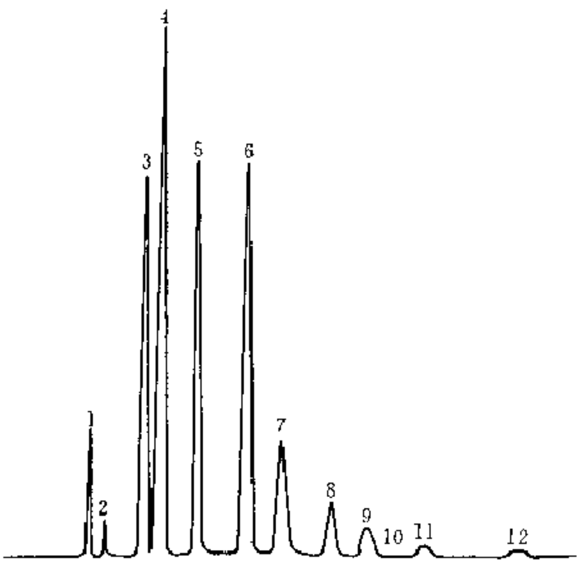


图 21-36　液化石油气气态烃（二）[27]

色谱峰：1—空气+甲烷；2—乙烷+乙烯；3—丙烷；4—丙烯；5—异丁烷；6—正丁烷；7—正丁烯+异丁烯；8—反-2-丁烯；9—顺-2-丁烯；10—1,3-丁二烯；11—异戊烷；12—正戊烷

色谱柱：26%（95%顺丁烯二酸二丁酯+5%β，β′-氧二丙腈），6201 担体（60 目~80 目），10m×3mm

柱　温：25℃

载　气：H_2，40ml·min^{-1}

检测器：TCD

第二节 汽油与柴油色谱图

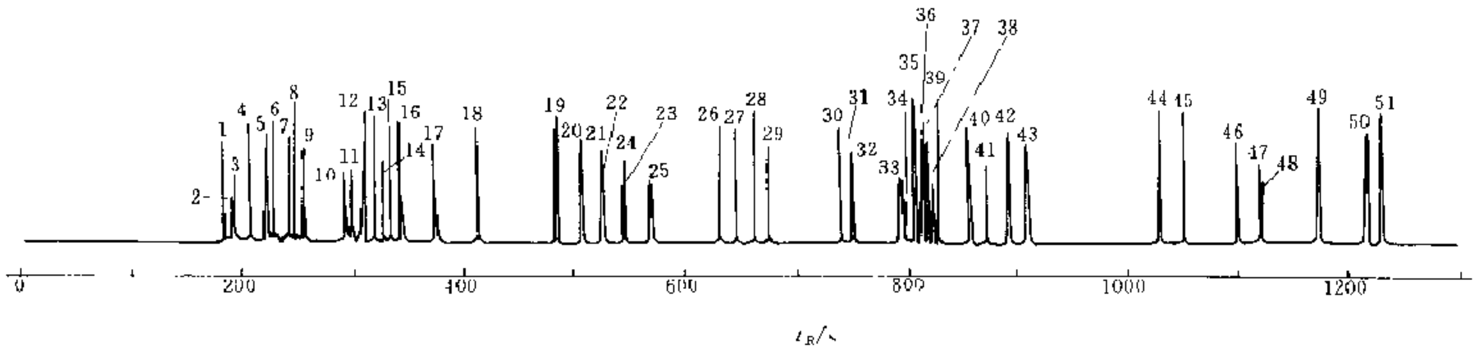


图 21-37 水煤气合成产品（C_1～C_7 烃）[28]

色谱峰：1—甲烷；2—乙烷；3—乙烯；4—丙烷；5—丙烯；6—乙炔；7—丙二烯；8—2-甲基丙烷；9—正丁烷；10—反-2-丁烯；11—1-丁烯；12—2-甲基-1-丙烯；13—顺-2-丁烯；14—丙炔；15—1,3-丁二烯；16—2-甲基丁烷；17—2,2-二甲基丙烷；18—正戊烷；19—2-甲基-1-丁烯；20—反-2-戊烯；21—反-2-甲基-2-丁烯；22—顺-2-甲基-2-丁烯；23—3-甲基-1-丁烯；24—1-戊烯；25—顺-2-戊烯；26—2-甲基戊烷；27—2,3-二甲基丁烷；28—3-甲基戊烷；29—2,2-二甲基丁烷；30—正己烷；31—反-2-甲基-2-戊烯；32—顺-2-甲基-2-戊烯；33—反-3-甲基-2-戊烯；34—顺-3-甲基-2-戊烯；35—2-乙基-1-丁烯；36—反-4-甲基-2-戊烯；37—2-甲基-1-戊烯；38—顺-4-甲基-2-戊烯；39—反-2-己烯；40—4-甲基-1-戊烯；41—1-己烯；42—顺-2-己烯；43—2,4-二甲基戊烷；44—3-甲基己烷；45—正庚烷；46—反-2-庚烯；47—反-5-甲基-2-己烯；48—顺-5-甲基-2-己烯；49—1-庚烯；50—顺-2-庚烯；51—2,4,4-三甲基-2-戊烯

色谱柱：Al_2O_3+KCl PLOT 柱，50m×0.32mm

载 气：He，2.5ml·min⁻¹

气化室温度：180℃

检测器温度：250℃

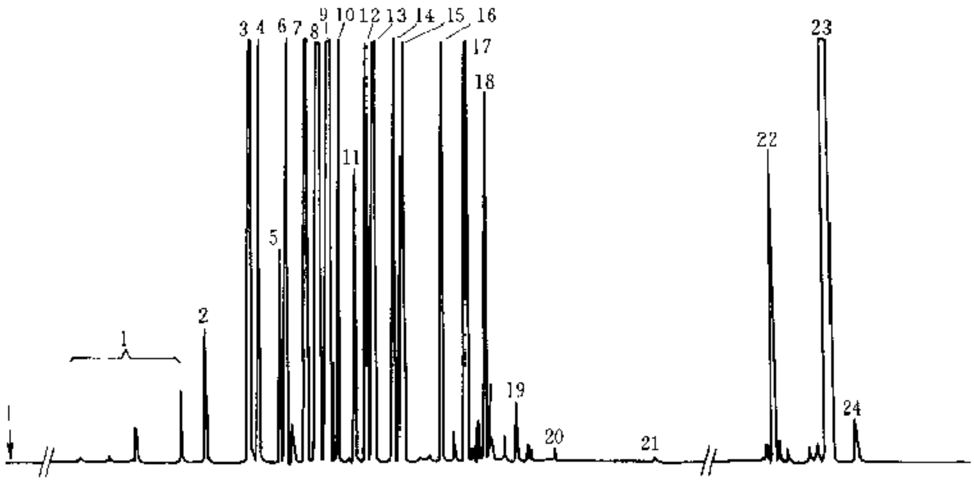


图 21-38　C_4～C_6烃[29]

色谱峰：1—C_4烃；2—3-甲基-1-丁烯；3—异戊烷；4—1,4-戊二烯；5—二甲基乙炔；6—1-戊烯；7—2-甲基-1-丁烯；8—正戊烷；9—异戊间二烯；10—反-2-戊烯；11—顺-2-戊烯；12—2-甲基-2-丁烯；13—反-1,3-戊二烯；14—1,3-环戊二烯；15—顺-1,3-戊二烯；16—环戊烯；17—环戊烷；18—2-甲基戊烷；19—3-甲基戊烷；20—正己烷；21—苯；22—共聚物；23—二环戊二烯；24—共聚物

色谱柱：CP-Sil 5 CB，50m×0.24mm　　载　气：N_2，100kPa

柱　温：−10℃（8min）→150℃，8℃·min⁻¹　　检测器：FID

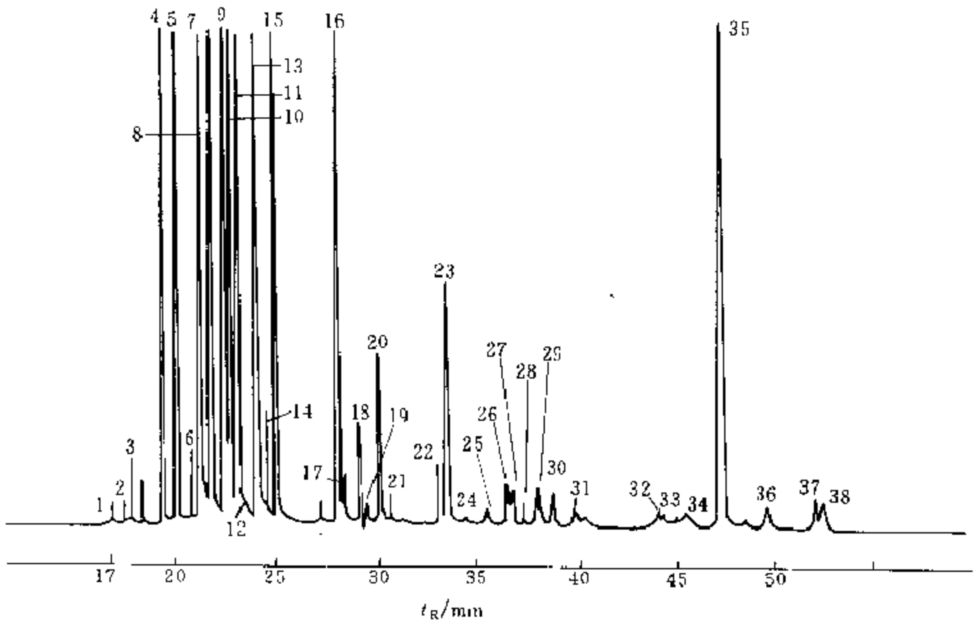


图 21-39　C_5馏分[21]

色谱峰：1—1-丁烯；2—反-2-丁烯；3—顺-2-丁烯；4—3-甲基-1-丁烯；5—1,4-戊二烯；6—2-甲基丁烷；7—1-戊烯；8—2-甲基-1-丁烯；9—异戊二烯；10—正戊烷；11—顺-2-戊烯；12—2-甲基-2-丁烯；13—1-反-3-戊二烯；14—1,3-环戊二烯；15—1-顺-3-戊二烯；16—环戊烯；17—3-甲基-1-戊烯；18—4-甲基-顺-2-戊烯；19—4-甲基-反-2-戊烯；20—1,5-己二烯；21—环戊烷；22—2-甲基-1-戊烯；23—1-己烯；24—1-顺-4-己二烯；25—反-3-己烯；26—反-2-己烯；27—2-甲基-2-戊烯；28—正己烷；29—顺-2-己烯；30—4,4-二甲基-1-戊烯；31—2,3-二甲基-1,3-丁二烯；32—2-甲基-1,3-环戊二烯；33—1-甲基-1,3-环戊二烯；34—甲基环戊烷；35—苯；36—1-甲基环戊烯；37—3-乙基-1-戊烯；38—5-甲基-1-己烯

色谱柱：角鲨烷，92m×0.24mm　　检测器：FID

柱　温：53℃　　气化室温度：250℃

载　气：N_2，$\bar{u}$=10.5 cm·s⁻¹；分流比=850：1　　检测器温度：250℃

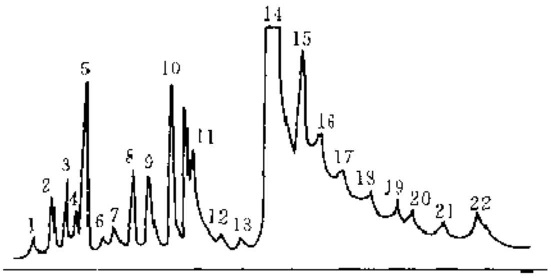


图 21-40 异戊二烯杂质[18]

色谱峰：1—异丁烷；2—异丁烯；3—异戊烷＋反-2-丁烯；4—顺-2 丁烯；5—3 甲基 1-丁烯；6—1,3 丁二烯；7—1-戊烯；8—2 甲基 1-丁烯；9—顺-2-戊烯；10—2-甲基-2 丁烯；11—3 甲基 1-戊烯＋4-甲基-1-戊烯；12—4-甲基-2-戊烯；13—2,3-二甲基-1-丁烯；14—异戊二烯；15—2,3-二甲基-2-丁烯；16—1-甲基-1-环戊烯；17—2,4,4 三甲基 1-戊烯；18—2,4,4-三甲基 2 戊烯；19—2,3-二甲基-2-戊烯；20—4-甲基-1,3-戊二烯；21—未知物；22—丙酮

色谱柱：20%二甲基环丁砜，6201 担体（60 目～80 目），6m×6mm　　柱　温：25℃

载　气：N_2，80ml・min^{-1}　　检测器：FID

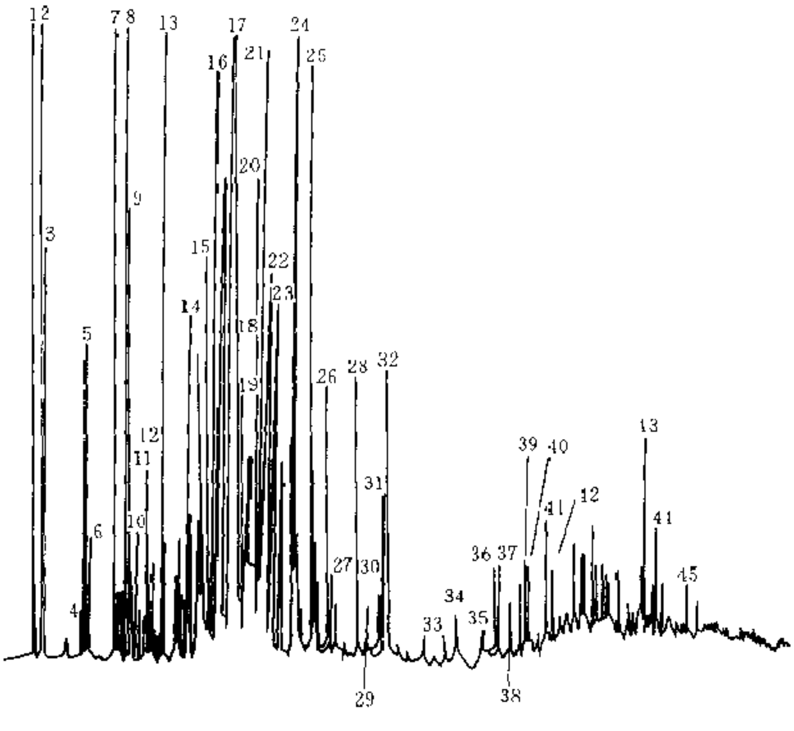


图 21-41 异戊二烯产品[32]

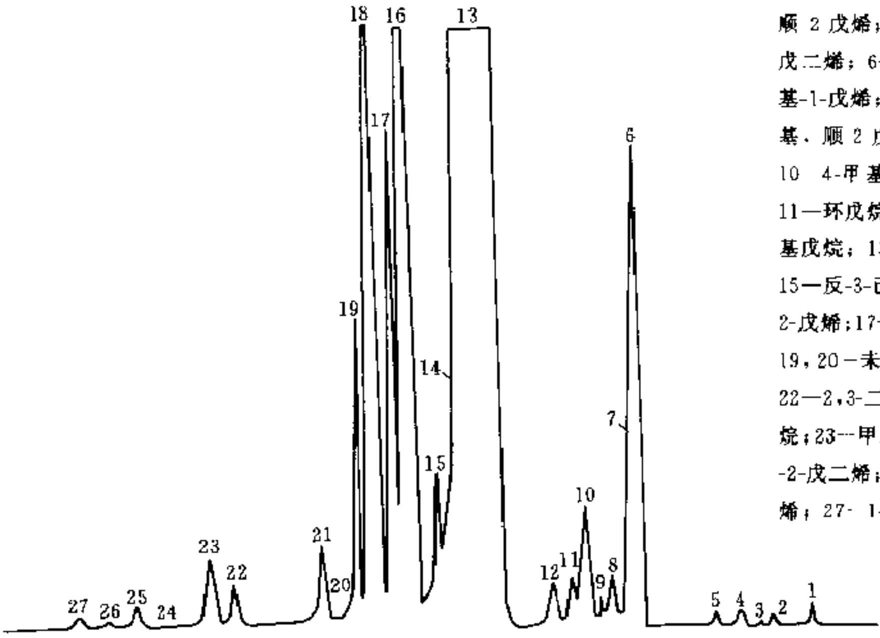
色谱峰：1—异丁烯；2—异戊二烯；3—2-甲基-1 丁烯；4—3-甲基环戊烯；5—3-甲基-2 丁酮；6—2 甲基丁醛；7—2,4,4-三甲基-1-戊烯；8、11，13—三甲基-2-戊烯；9—3-亚甲基庚烷；10—2,2 二甲基-3-己烯；12—丙基环己烷；14—2,3 二甲基-3-庚炔；15，16，18，20，22，25—二甲基环己烯；17—3,5,5 三甲基环己烯；19—3-乙基-2-甲基-1,3-己二烯；21—7-甲基-3 辛炔；23—2 正丙基-4-甲基呋喃；24—甲基-3 辛炔；26—壬炔；27—1-蓋烯；28—1,2,3-三甲基苯；29—三异丁烯；30—冰片烯；31—邻甲基异丙基苯；32—甲基异丙基苯；33—4-乙基，1,2-二甲基苯；34—1-甲基，3,5-二甲基苯；35—1,2 二甲基苯；36—间甲基异丙基苯；37—1-甲基，3-(1 甲基乙基) 苯；38—1 异丁烯 4-甲基苯；39—二甲基乙基苯；40—2,3-二氢-1，1-二甲基茚；41—2,3-二氢-1,3 二甲基茚；42—4-(2,6,6-三甲基环己烯)-丁烯-3-酮-2；43—2,4,5-三甲基乙基苯；44—6-乙基-1,2,3,4-四氢萘；45—1,3,5-三甲基-乙-环丙基苯

色谱柱：SE-54　SCOT 柱，43m×0.26mm

柱　温：40℃（5min）→100℃，2℃・min^{-1}→310℃（12min），4℃・min^{-1}

载　气：He

检测器：MS

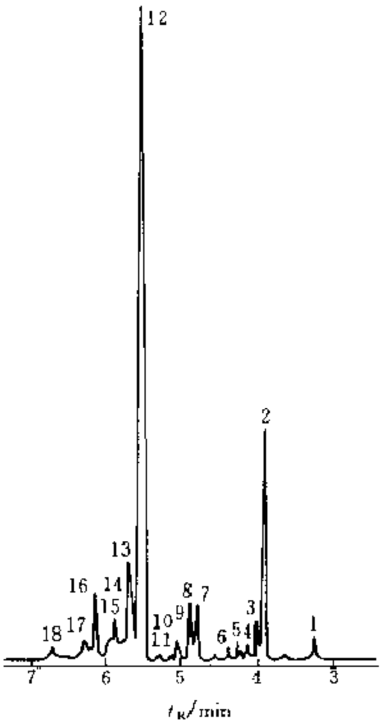


色谱峰：

1—1-戊烯；2—正戊烷+反 2 戊烯；3-顺 2 戊烯；4—1，反-3-戊二烯；5- 1,2 戊二烯；6—1,1,2-三甲基环戊烯+4-甲基-1-戊烯；7—3-甲基-1-戊烯；8—4-甲基、顺 2 戊烯；9—2,3 二甲基 1-丁烯；10 4-甲基，反-2-戊烯+1、5-己二烯；11—环戊烷+2,3-二甲基丁烷；12—2 甲基戊烷；13—1-己烯；14—3-甲基戊烷；15—反-3-己烯+顺-3-己烯；16—2-甲基 2-戊烯；17—正己烷；18—3 甲基环戊烷；19，20—未知物；21—3-甲基-反-2-戊烯；22—2,3-二甲基-2-丁烯+2,2-二甲基戊烷；23—甲基环戊烷；24—4,4-二甲基-反-2-戊二烯；25—苯；26—2,4 二甲基 2 戊烯；27- 1-甲基环戊烯

图 21-42 蜡裂解的六碳烯烃[33]

色谱柱：角鲨烷 SCOT 柱，91m×0.3mm
柱 温：50℃
载 气：N_2
检测器：FID
气化室温度：250℃
检测器温度：100℃



色谱峰：1 1-丁烯；2—1-戊烯；3—乙基环丙烷；4—2-甲基-1-丁烯；5—2 甲基-2-丁烯；6—1,3 戊二烯；7 4-甲基-1-戊烯；8 4-甲基-2-戊烯；9—环戊烷；10—2-甲基-1,3-戊二烯；11—2,3-二甲基-1,3 丁二烯；12—1-己烯；13—己烷；14—2-己烯；15—3-甲基-2 戊烯；16- 3-甲基-1,4-戊二烯；17—3 甲基环戊烯；18—甲基环戊烷

色谱柱：SE-54，40m×0.25mm
柱 温：50℃
载 气：N_2
检测器：FID
气化室温度：250℃
检测器温度：250℃

图 21-43 1-己烯羰化原料[34]

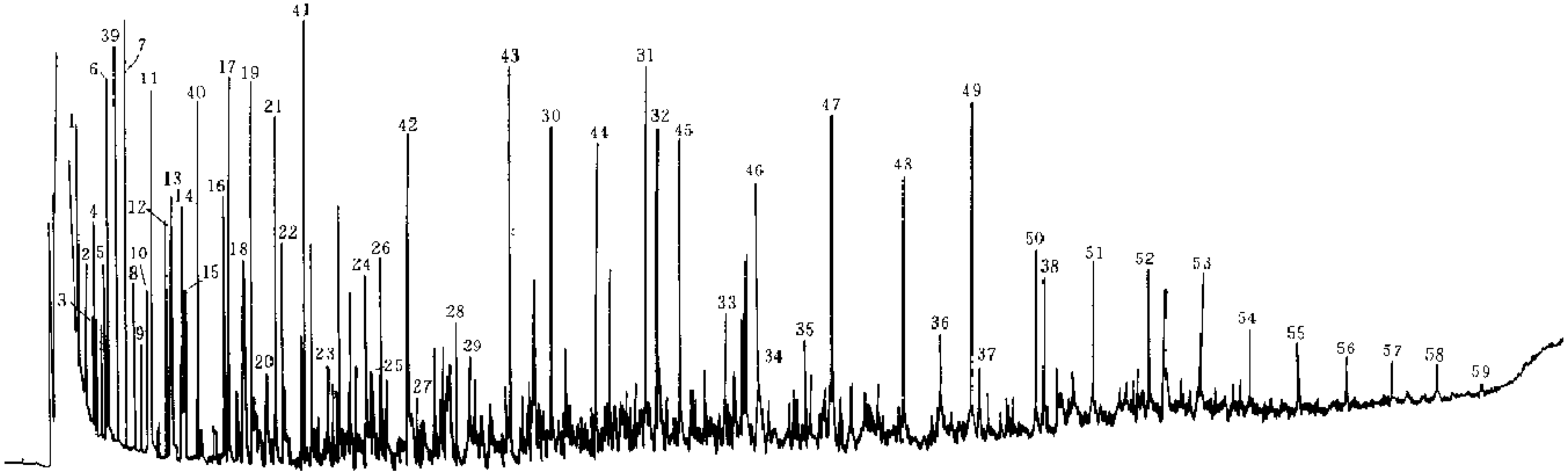


图 21-44 油页岩中烃类 ($C_5 \sim C_{27}$)[36]

色谱峰：1—甲基环戊烷；2—环己烷；3—苯；4—2-甲基己烷；6—二甲基环戊烷；7—甲基环己烷；8—乙基环戊烷；10—三甲基环戊烷；11—甲苯；12—2-甲基庚烷；13—二甲基环己烷；14—甲基乙基环戊烷；15—二甲基环己烷；16—乙基环己烷；17—三甲基环己烷；18—乙基苯；19—间或对二甲苯；20—烷基环己烷；21—邻二甲苯；22—甲基乙基环己烷；23—丙基环己烷；24—正丙基苯；25—甲基乙基苯；26—正丁基苯；28—烷基苯；29—萘；30—四甲基苯；31—2-甲基萘；32—1-甲基萘；34—二甲基萘；35—C_{14}异戊间二烯；36—C_{16}异戊间二烯；37—姥鲛烷；38—植烷；39—正庚烷；40—正辛烷；41—正壬烷；42—正癸烷；43—正十一烷；44—正十二烷；45—正十三烷；46—正十四烷；47—正十五烷；48—正十六烷；49—正十七烷；50—正十八烷；51—正十九烷；52—正二十烷；53—正二十一烷；54—正二十二烷；55—正二十三烷；56—正二十四烷；57—正二十五烷；58—正二十六烷；59—正二十七烷；5，9，27，33—未知物

色谱柱：DB-1，30m×0.25mm

柱　温：20℃（3min）→30℃（3min）→280℃，4℃·min^{-1}→300℃（10min），10℃·min^{-1}

载　气：H_2

检测器：FID

气化室温度：350℃

检测器温度：350℃

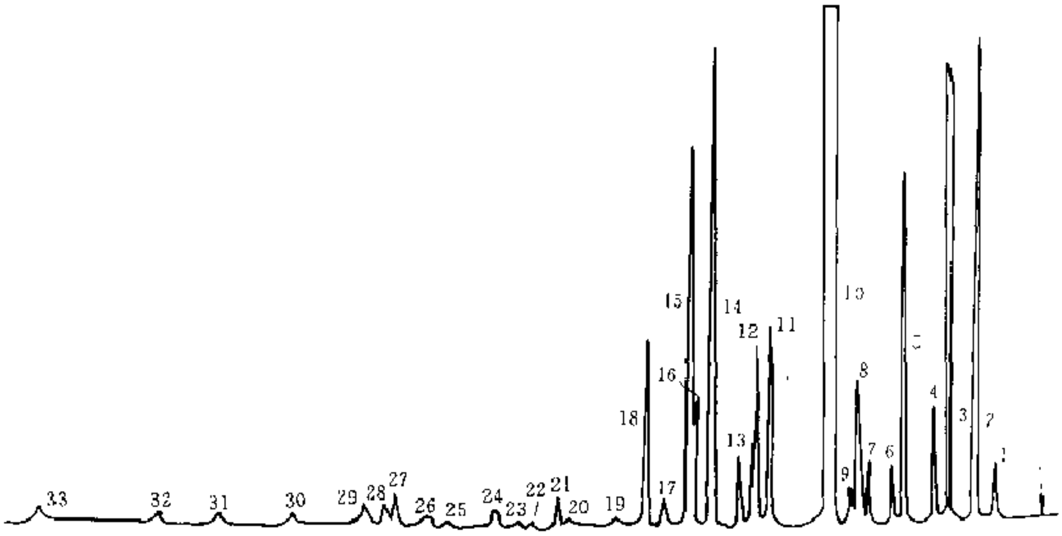


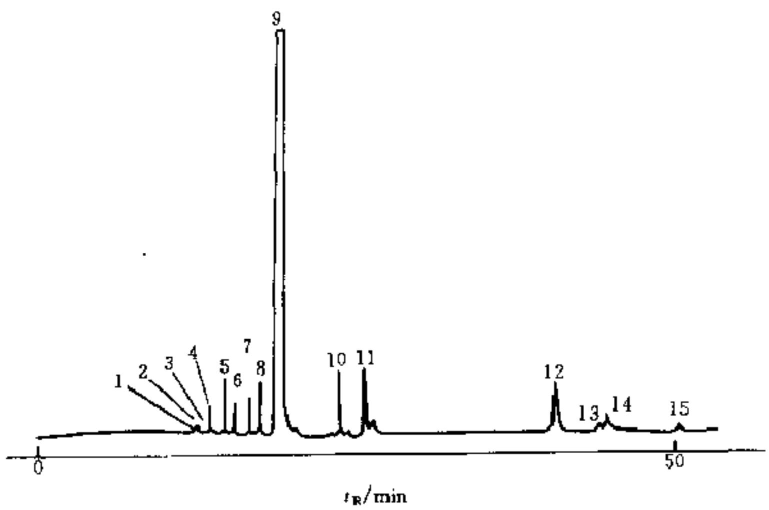
图 21-45　工业异辛烷[35]

色谱峰：1—异丁烷；2—2-甲基丁烷；3—2,3-二甲基丁烷；4—3-甲基戊烷；5—2,4-二甲基戊烷；6—2,2,3-三甲基丁烷；7—2-甲基己烷；8—2,3-二甲基戊烷；9—3-甲基己烷；10—2,2,4-三甲基戊烷；11—2,5-二甲基己烷；12—2,4-二甲基己烷；13—2,2,3-三甲基戊烷；14—2,3,4-三甲基戊烷；15—2,3-二甲基己烷；16—2-甲基庚烷；17—3-甲基庚烷；18—2,2,5-三甲基己烷+1,顺-2,反-4-三甲基环己烷+3-甲基,3-乙基戊烷；19—2,2,4-三甲基己烷；20—2,4,4-三甲基己烷；21—2,3,5-三甲基己烷；22—2,4-二甲基庚烷；23—2,2,3-三甲基己烷+2,6-二甲基庚烷；24—2,5-二甲基庚烷；25—1,1,4-三甲基己烷+3,3-二甲基庚烷+2,3,3-三甲基己烷；26—2,3,4-三甲基己烷；27—1,反-2,顺-3-三甲基环己烷；28—1,1,2-三甲基环己烷；29—1-甲基,顺-3-乙基环己烷；30—异丙基环己烷；31—C_{10}异构体；32—C_{10}异构体；33—4-甲基壬烷

色谱柱：30% 异三十烷 SCOT 柱，70m×0.3mm　　检测器：FID

柱　温：70℃　　气化室温度：220℃

载　气：He　　检测器温度：150℃



色谱峰：1—异丁烷；2—正丁烷；3—异戊烷；4—正戊烷；5—环丙烷；6—正己烷；7—甲基环戊烷；8—苯；9—环己烷；10—甲基环己烷；11—甲苯；12—乙基苯；13—对二甲苯；14—间二甲苯；15—邻二甲苯

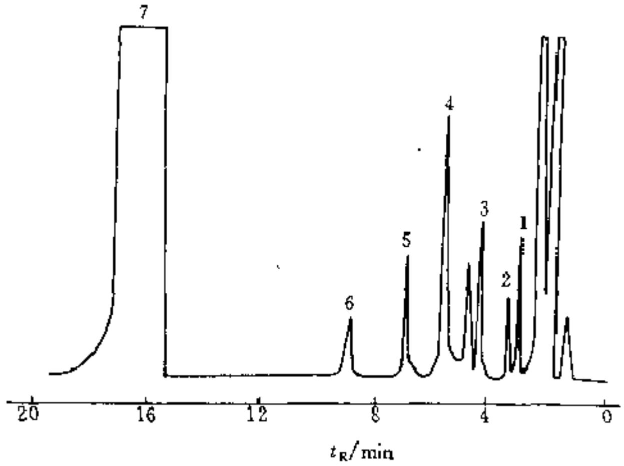
色谱柱：角鲨烷，100m×0.5mm

柱　温：70℃

载　气：N_2

检测器：FID

图 21-46　环己烷中杂质



色谱峰：1—环戊烷；2—己烯；3—甲基环戊烷；4—环己烷；5—正庚烷；6—甲基环己烷；7—苯

色谱柱：10% 季戊四醇＋10% 苯并喹啉＋10%α-苯胺质量比为 1：1：0.75，201 酸洗担体(80 目～100 目)，4m×3.5mm

柱　温：35℃

载　气：N_2

检测器：FID

气化室温度：180℃

图 21-47　苯中环烷杂质[38]

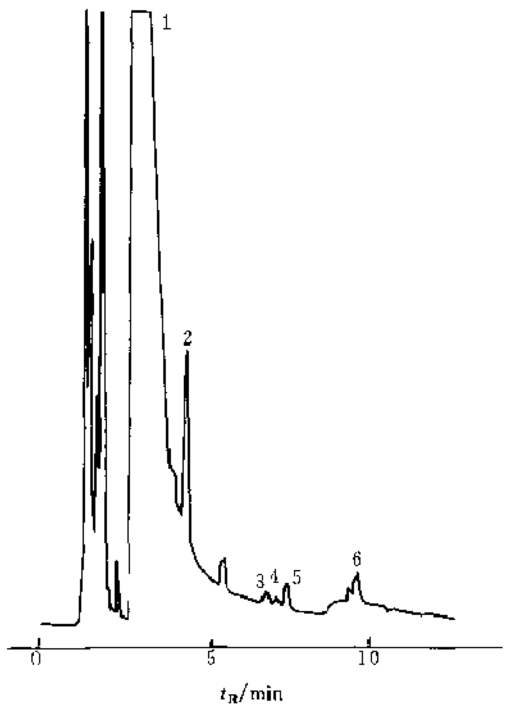


图 21-48　苯中二甲苯杂质

色谱峰：1—苯；2—甲苯；3—乙基苯；4—对二甲苯；5—间二甲苯；6—邻二甲苯

色谱柱：CP-Wax51，25m×0.5mm

柱　温：70℃

载　气：He

检测器：FID

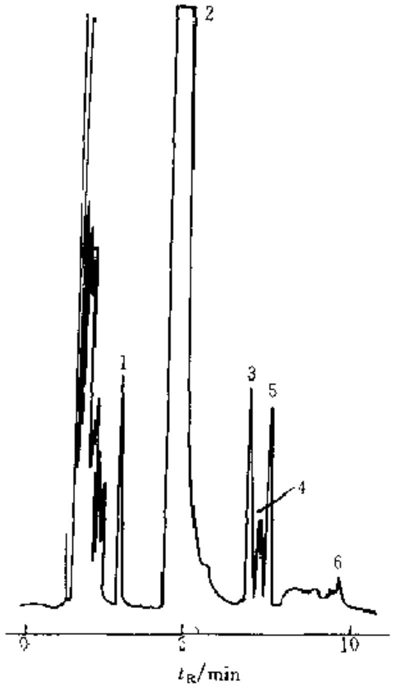


图 21-49　甲苯中二甲苯杂质

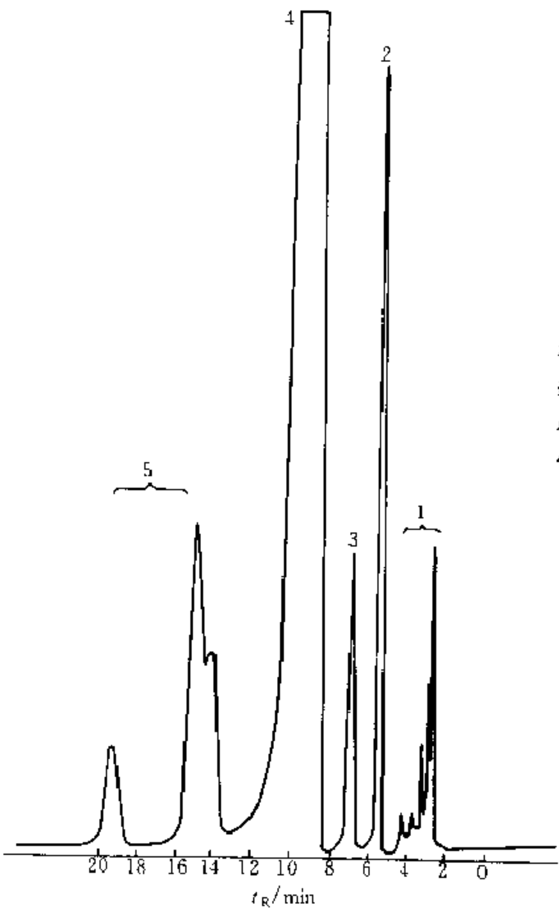
色谱峰：1—苯；2—甲苯；3—乙基苯；4—对二甲苯；5—间二甲苯；6—邻二甲苯

色谱柱：CP-Wax51，25m×0.5mm

柱　温：70℃

载　气：He

检测器：FID



色谱峰：1—非芳烃组分；2—苯；3—正癸烷；4—甲苯；5—C_8芳烃组分

色谱柱：33% Carbowax 1500，6201担体（60目～80目），4m×2mm

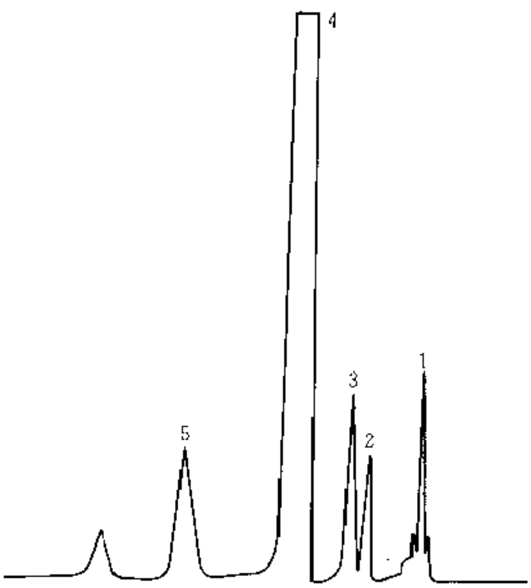
柱　温：100℃

载　气：H_2

检测器：FID

气化室温度：180℃

图 21-50　甲苯中烃类杂质[39]



色谱峰：1—非芳烃组分；2—苯；3—正癸烷；4—甲苯；5—C_8芳烃

色谱柱：33.3% Carbowax 1500，6201酸洗担体（60目～80目），4m×2mm

柱　温：100℃

载　气：H_2

检测器：FID

气化室温度：200℃

图 21-51　焦化甲苯中烃类杂质[40]

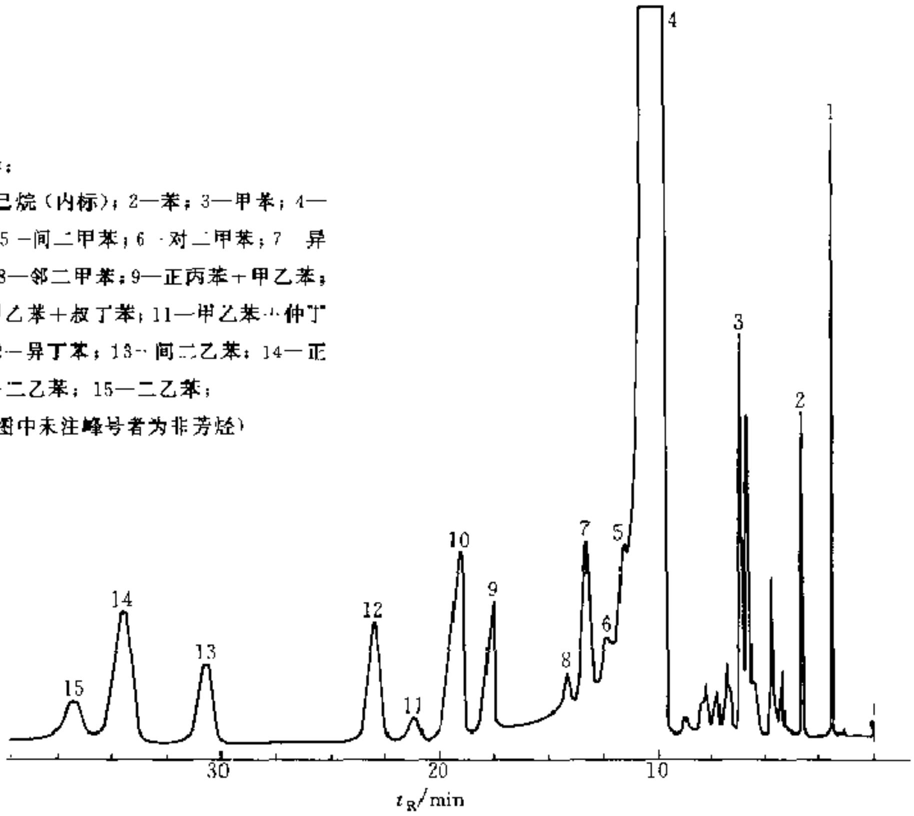


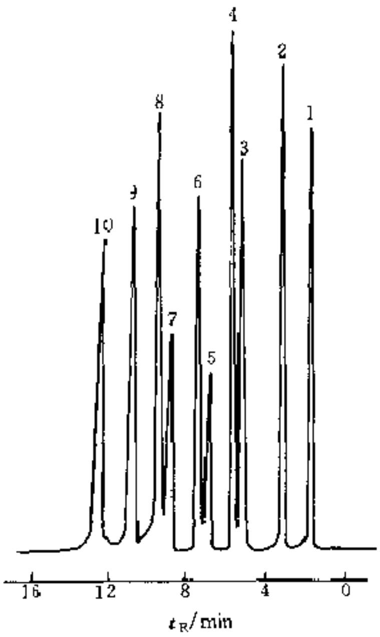
图 21-52　工业乙苯中杂质[41]

色谱柱：双（对庚氧基苯甲酸）邻甲基对苯二酚酯＋上海试剂厂 202 硅烷化担体（60 目～80 目）质量比为 5：95，6m×3mm

柱　温：84℃　　　　气化室温度：220℃

载　气：H_2，48ml·min^{-1}　　　　检测器温度：160℃

检测器：FID



色谱峰：1—苯；2—甲苯；3—乙基苯；4—对二甲苯；5—间二甲苯；6—异丙基苯；7—正丙基苯；8—甲基乙基苯；9—1，2，4-三甲基苯；10—正丁基苯

色谱柱：5% Apiezon M，201 担体（60 目～80 目）＋Tween80，201 担体（60 目～80 目）质量比为 1：1.5　4m×4mm

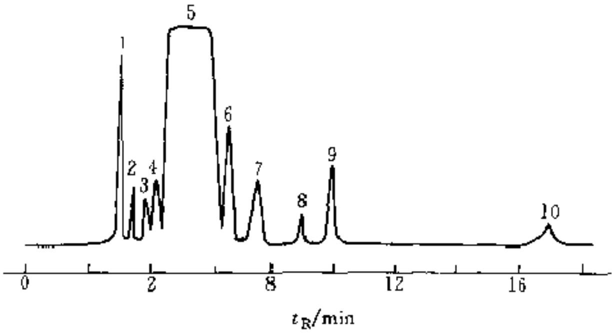
柱　温：84℃

载　气：H_2

检测器：FID

气化室温度：200℃

图 21-53　异丙基苯中杂质



色谱峰：
1—乙基苯；2—异丙基苯；3—正丙基苯；4—甲基乙基苯；5—苯乙烯；6—α-甲基苯乙烯；7—甲基苯乙烯；8—β-甲基苯乙烯；9—乙基乙烯基苯；10—二乙烯基苯

图 21-54 苯乙烯中杂质[43]

色谱柱：20% 新戊四腈，6201 担体（60 目～80 目），4m×4mm　　柱 温：110℃

载 气：N_2　　检测器：FID

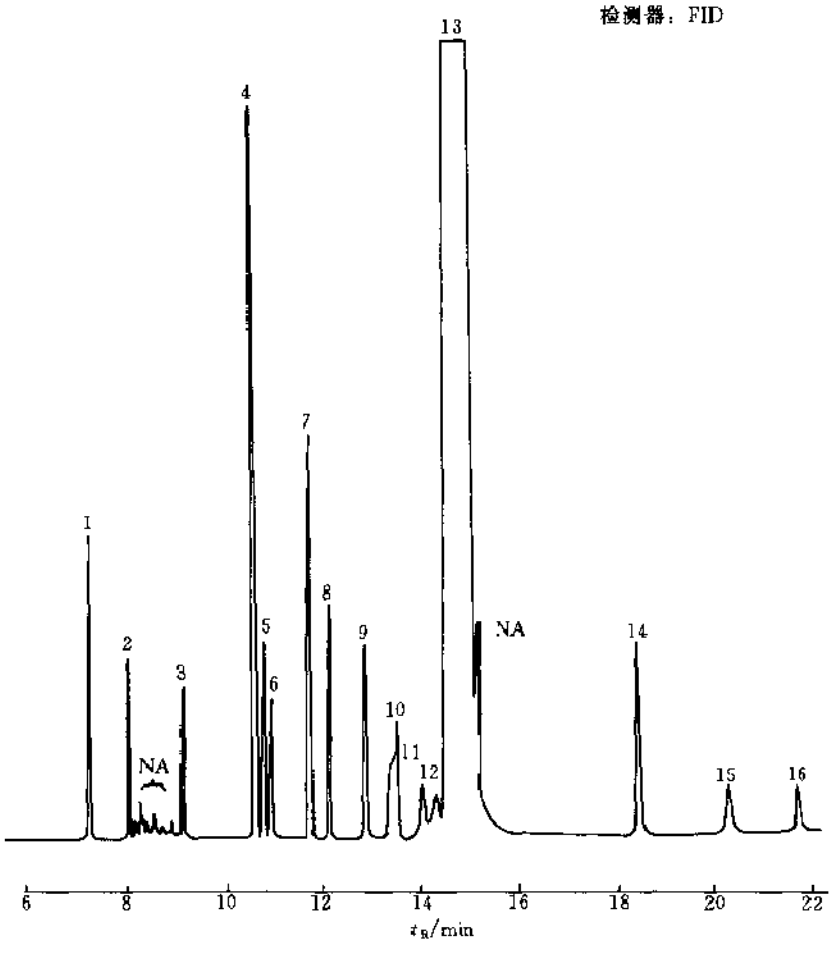
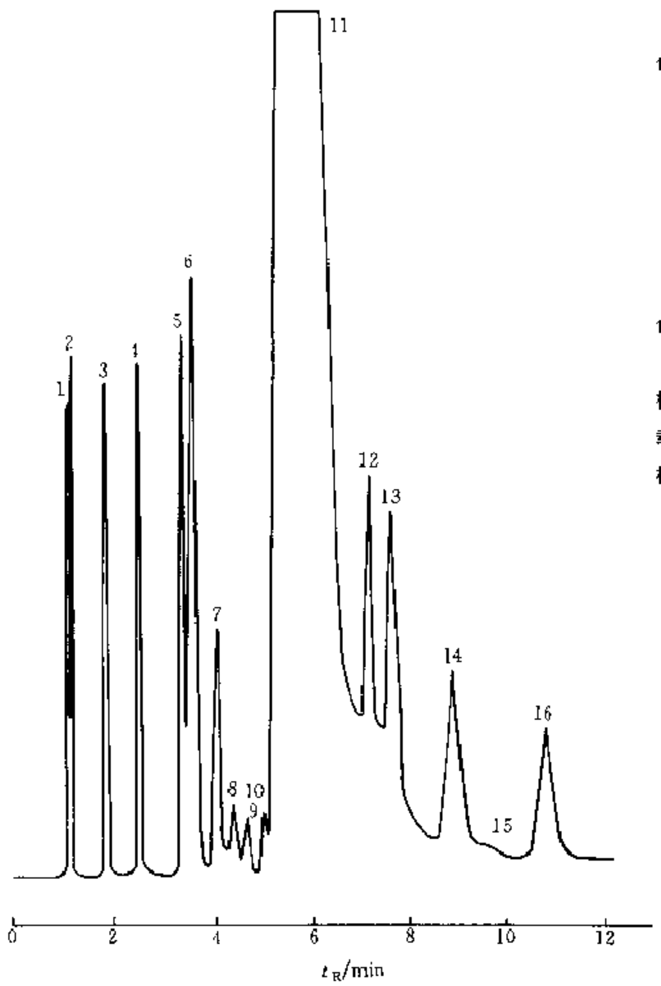


图 21-55 工业苯乙烯（一）[16]

色谱峰：1—正庚烷；2—苯；3—甲苯；4—乙苯；5—对二甲苯；6—间二甲苯；7—异丙苯；8—邻二甲苯；9—正丙苯；10—甲乙苯；11—叔丁苯；12—仲丁苯；13—苯乙烯；14—α-甲基苯乙烯；15—苯乙炔+3-甲基苯乙烯；16—β-甲基苯乙烯；NA-非芳香烃

色谱柱：FFAP，50m×0.25mm　　载 气：N_2，0.5ml・min^{-1}

柱 温：100℃　　检测器：FID



色谱峰：1—正己烷；2—正庚烷；3—苯；4—甲苯；5—乙苯；6—间，对二甲苯；7—异丙苯；8—邻二甲苯；9—正丙苯；10—甲乙苯；11—苯乙烯；12—苯乙炔；13—α-甲基苯乙烯；14—δ-甲基苯乙烯；15—未知物；16—β-甲基苯乙烯

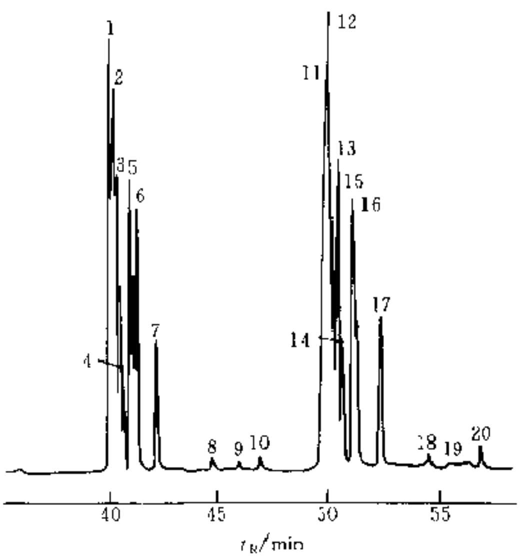
色谱柱：10% 聚乙二醇己二酸酯，上海试剂厂 201 酸洗担体，4m×3mm

柱　温：110℃

载　气：H_2，60ml·min^{-1}

检测器：FID

图 21-56　工业苯乙烯（二）[44]



色谱峰：1—顺-5-十一烯；2—反-5-十一烯；3—顺-4-十一烯；4—反-4-十一烯；5—正十一烷；6—正-1-十一烯；7—反-2-十一烯；8—4-丙基-乙基苯；9—正戊基苯；10-1-甲基-4-异丁基苯；11—反-4-十二烯；12—顺-3-十二烯；13—反-3-十二烯；14—反-4-十二烯；15—正十二烷；16—正十二-1-烯；17—反-2-十二烯；18—4-仲丁基-乙基苯；19—正己基苯；20—1，3 二甲基-丁基苯

色谱柱：OV-1，50m×0.2mm，d_f=0.25μm

柱　温：65℃→180℃，1.5℃·min^{-1}

载　气：N_2，1ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：200℃

检测器温度：160℃

图 21-57　烷烯分离装置产物[45]

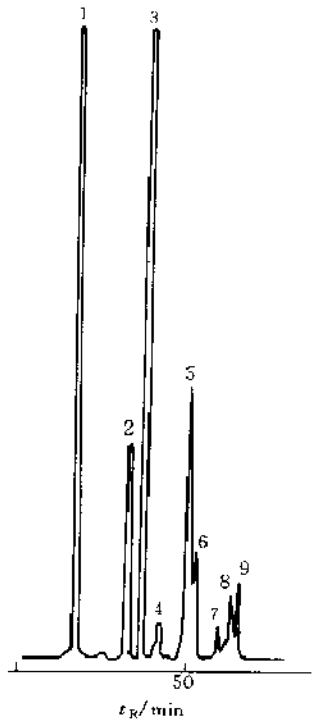


图 21-58　环十二碳三烯加氢产物[46]

色谱峰：1—反，反，反-环十二碳-1,5,9-三烯；2—反，反-环十二碳-1,5-二烯；3—顺，反，反-环十二碳-1,5,9-三烯；4—顺，顺，反-环十二碳-1,5,9-三烯；5—反环十二碳烯；6—顺，反-环十二碳-1,5-二烯；7—顺，顺-环十二碳-1,5-二烯；8—顺环十二碳烯；9—环十二碳烷

色谱柱：聚二甲基硅氧烷，50m×0.25mm 两根串联，$d_f=1\mu m$

柱　温：160℃　　气化室温度：280℃

载　气：N_2　　检测器温度：280℃

检测器：FID

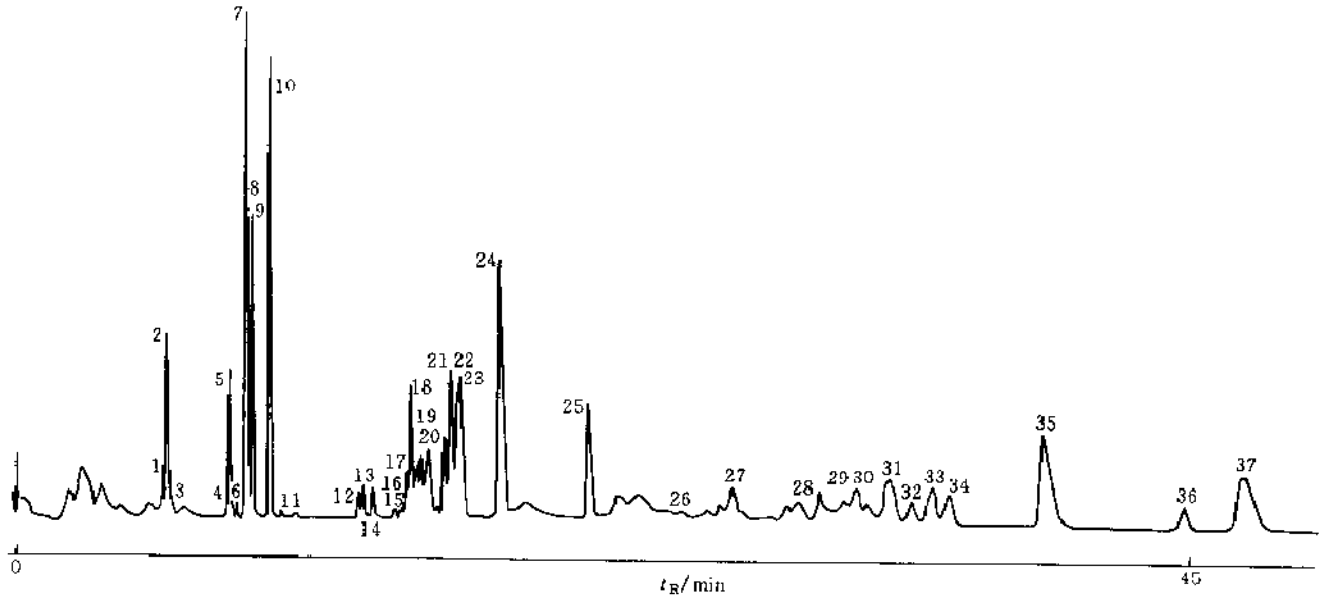


图 21-59　石脑油组分[47]

色谱峰：1—甲基环戊烷；2—环己烷；3—正己烷；4—1,1-二甲基环戊烷；5—反-1,2-二甲基环戊烷；6—2,2-二甲基环戊烷+2,4-二甲基戊烷；7—甲基环己烷；8—乙基环戊烷；9—3-甲基己烷+2-甲基己烷+2-乙基戊烷；10—正庚烷；11—环庚烷；12—1,1,3-三甲基环戊烷；13—1,2,4-三甲基环戊烷（α,β,β）+1,2,4-三甲基环戊烷（α,β,α）；14—1,2,3-三甲基环戊烷（α,α,β）；15—1,1,2-三甲基环戊烷；16—顺-八氢化戊搭烯；17—1-乙基，2-甲基环戊烷（反式）；18—1,3-二甲基环己烷（反式）；19—1,4-二甲基环己烷（反式）；20—1,2-二甲基环己烷（反式）；21—乙基环己烷；22—3-甲基庚烷；23—2-甲基庚烷；24—正辛烷；25—甲苯；26—八氢化-2-甲基戊搭烯；27—1,3,5-三甲基环己烷（α,α,α）；28—2,4-二甲基庚烷；29—1-乙基，2-甲基环己烷（反式）+2,5-二甲基庚烷；30—2,6-二甲基庚烷；31—2,3-二甲基庚烷+4-甲基辛烷；32—正丙基环己烷；33—3-甲基辛烷；34—2-甲基辛烷；35—正壬烷；36—乙基苯；37—间二甲基苯+对二甲基苯

色谱柱：Al_2O_3+KCl PLOT 柱，50m×0.32mm

柱　温：190℃

载　气：He，130kPa

检测器：FID

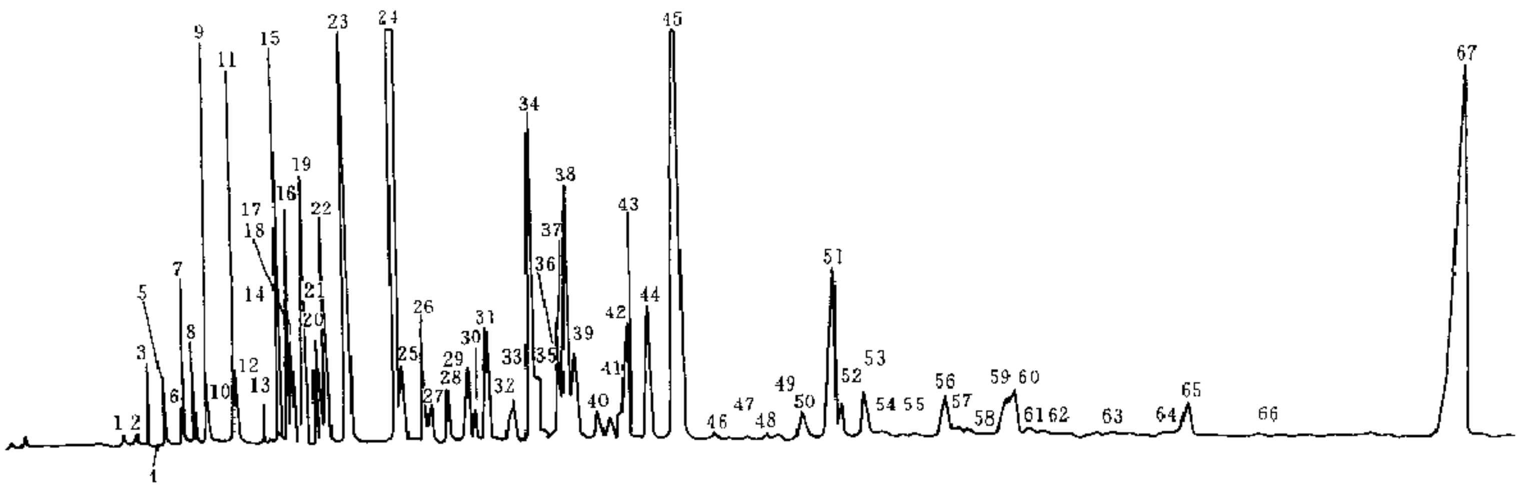


图 21-60 重整原料油[46]

色谱峰：1—未知物；2—2-甲基丁烷；3—正戊烷；4—未知物；5—2,2-二甲基丁烷；6—2,3-二甲基丁烷+环戊烷；7—2-甲基戊烷；8—3-甲基戊烷；9—正己烷；10—2,2-二甲基戊烷；11—2,4-二甲基戊烷+甲基环戊烷；12—2,2,3-三甲基丁烷；13—苯；14—3,3-二甲基戊烷；15—环己烷；16—2-甲基己烷；17—2,3-二甲基戊烷；18—1,1-二甲基环戊烷；19—3-甲基己烷+1,1-二甲基环戊烷；20—1，顺-3-二甲基环戊烷；21—3-乙基戊烷+1，反-3-二甲基环戊烷；22—2,2,4-三甲基戊烷+1，反-2-二甲基环戊烷+1，反-3-二甲基环戊烷；23—正庚烷；24—2,2-二甲基己烷+2,2,3,3-四甲基丁烷+甲基环己烷；25—1,1,3-三甲基环戊烷+甲基环己烷；26—2,4-二甲基己烷+乙基环戊烷；27—2,4-二甲基己烷+2,2,3-三甲基戊烷；28—1，反-2，顺-4-三甲基环戊烷；29—1，反-2，顺-3-三甲基环戊烷；30—2,3,4-三甲基戊烷；31—未知物；32—2,3-二甲基己烷+2-甲基，3-乙基戊烷；33—2-甲基，3-乙基戊烷+1,1,2-三甲基环戊烷；34—2-甲基庚烷+4-甲基庚烷；35—3,4-二甲基己烷；36—3,4-二甲基己烷；37—3-甲基庚烷+2,2,4,4-四甲基戊烷+1，顺-2，顺-4-三甲基环戊烷；38—3-乙基己烷+3-甲基，3-乙基戊烷+1，顺-2，反-3-三甲基环戊烷+1，顺-2，顺-4-三甲基环戊烷；39—2,2,5-三甲基己烷+1，顺-3-二甲基环己烷+1，反-4-二甲基环己烷；40—未知物；41—1-乙基，顺-3-甲基环戊烷；42—2,2,4-三甲基己烷+1-甲基，反-2-乙基环戊烷+1-甲基，顺-3-乙基环戊烷+1-乙基，反-2-甲基环戊烷+1-乙基，反-3-甲基环戊烷；43—2,2,4-三甲基己烷+1-甲基，1-乙基环戊烷；44—1，反-2-二甲基环己烷；45—正辛烷+1，顺-2，顺-3-三甲基环戊烷-1，反-3-二甲基环己烷-1，顺-4-二甲基环己烷；46—2,4,4-三甲基己烷+异丙基环戊烷；47—2,3,5-三甲基己烷；48—2,2-二甲基庚烷+2,2,3,4-四甲基戊烷-1-甲基，顺-2-乙基环戊烷+1-乙基，顺-2-甲基环戊烷；49—2,2,3-三甲基己烷；50—2,4-二甲基庚烷+2,2-二甲基，3-乙基戊烷+正丙基环戊烷+1，顺-2-二甲基环己烷；51—2,6-二甲基庚烷+4,4-二甲基庚烷+2-甲基，4-乙基己烷；52—乙基环己烷；53—2,5-二甲基庚烷+3,5-二甲基庚烷，54—3,3-二甲基庚烷+1,1,3-三甲基环己烷+2,4-二甲基，3-乙基环戊烷；55—2,3,3-三甲基己烷；56—2-甲基，3-乙基己烷+乙基苯；57—2,3,4-三甲基己烷；58—2,3,4-三甲基己烷+2,2,3,3-四甲基戊烷；59—2,3-二甲基庚烷；60—3-甲基，3-乙基己烷+2,3,3,4-四甲基戊烷+1,4-二甲基苯；61—3,4-二甲基庚烷+3-甲基，4-乙基己烷；62—1,3-二甲基苯；63—2-甲基辛烷+4-甲基辛烷；64—3-甲基辛烷+2,3-二甲基，3-乙基戊烷；65—1,1,2-三甲基环己烷+1,2-二甲基苯；66—未知物；67—正壬烷

色谱柱：OV 101 SCOT 柱，40m×0.23mm

柱　温：50℃

载　气：N_2

检测器：FID

气化室温度：200℃

检测器温度：200℃

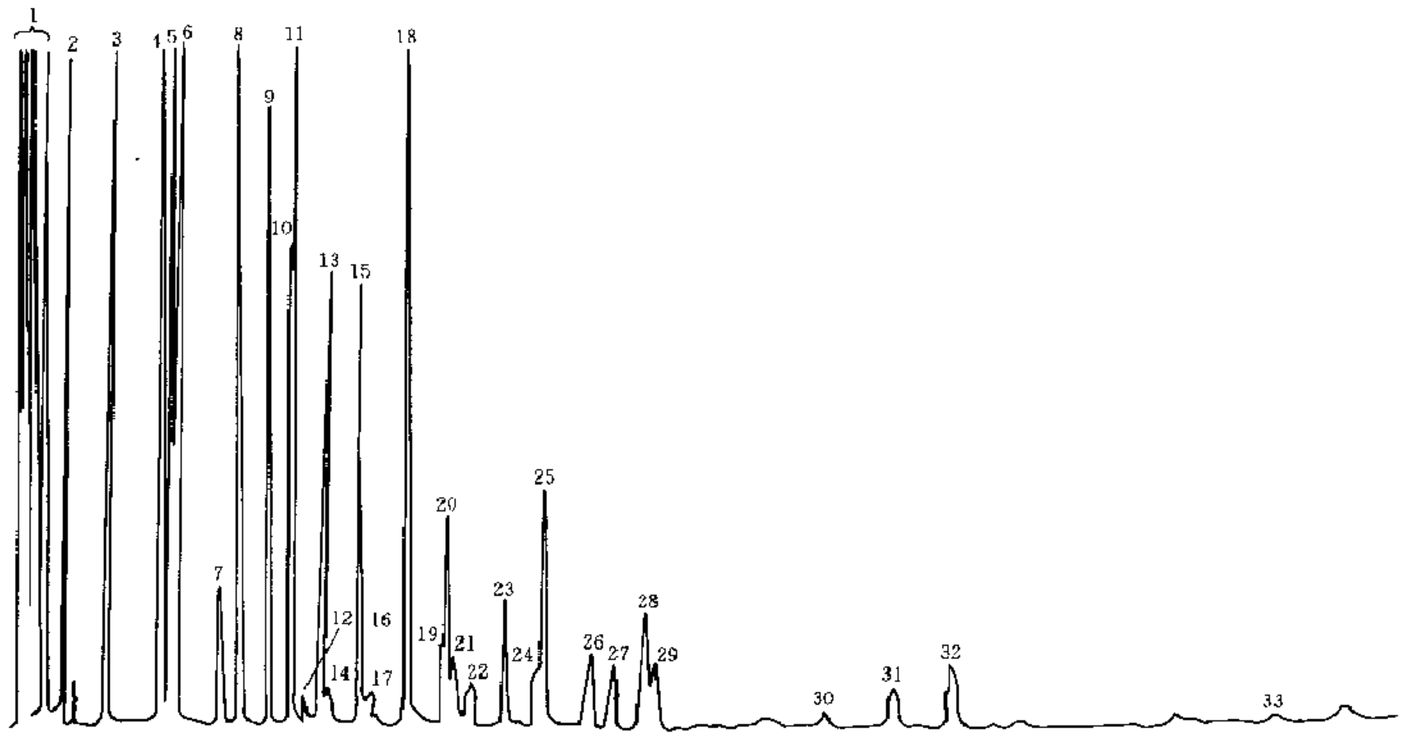


图 21-61　重整汽油中的芳烃[49]

色谱峰：1—非芳烃化合物；2—苯；3—甲基苯；4—乙基苯；5—对二甲基苯；6—间二甲基苯；7—异丙基苯；8—邻二甲基苯；9—正丙基苯；10—1,4-甲基乙基苯；11—1,3-甲基乙基苯；12—异丁基苯；13—1,3,5-三甲基苯；14—仲丁基苯；15—1,2-甲基乙基苯；16—1,3-甲基异丙基苯；17—1,4-甲基异丙基苯；18—1,2,4-三甲基苯；19—1,3甲基正丙基苯；20—1,4-甲基正丙基苯；21—1,4-二乙基苯；22—正丁基苯；23—1,3-二甲基，5-乙基苯；24—1,2-二乙基苯；25—1,2,3-三甲基苯；26—1,4-二甲基，2-乙基苯；27—1,3-二甲基，4-乙基苯；28—1,2-二甲基，4-乙基苯；29—1,2二甲基，3-乙基苯；30—1,2,4,5-四甲基苯；31—1,2,3,5-四甲基苯；32—1,2,3,4-四甲基苯；33未知物

色谱柱：Carbowax 20M，26m×0.20mm

柱　温：80℃

载　气：N_2，0.57 ml·min^{-1}

检测器：FID

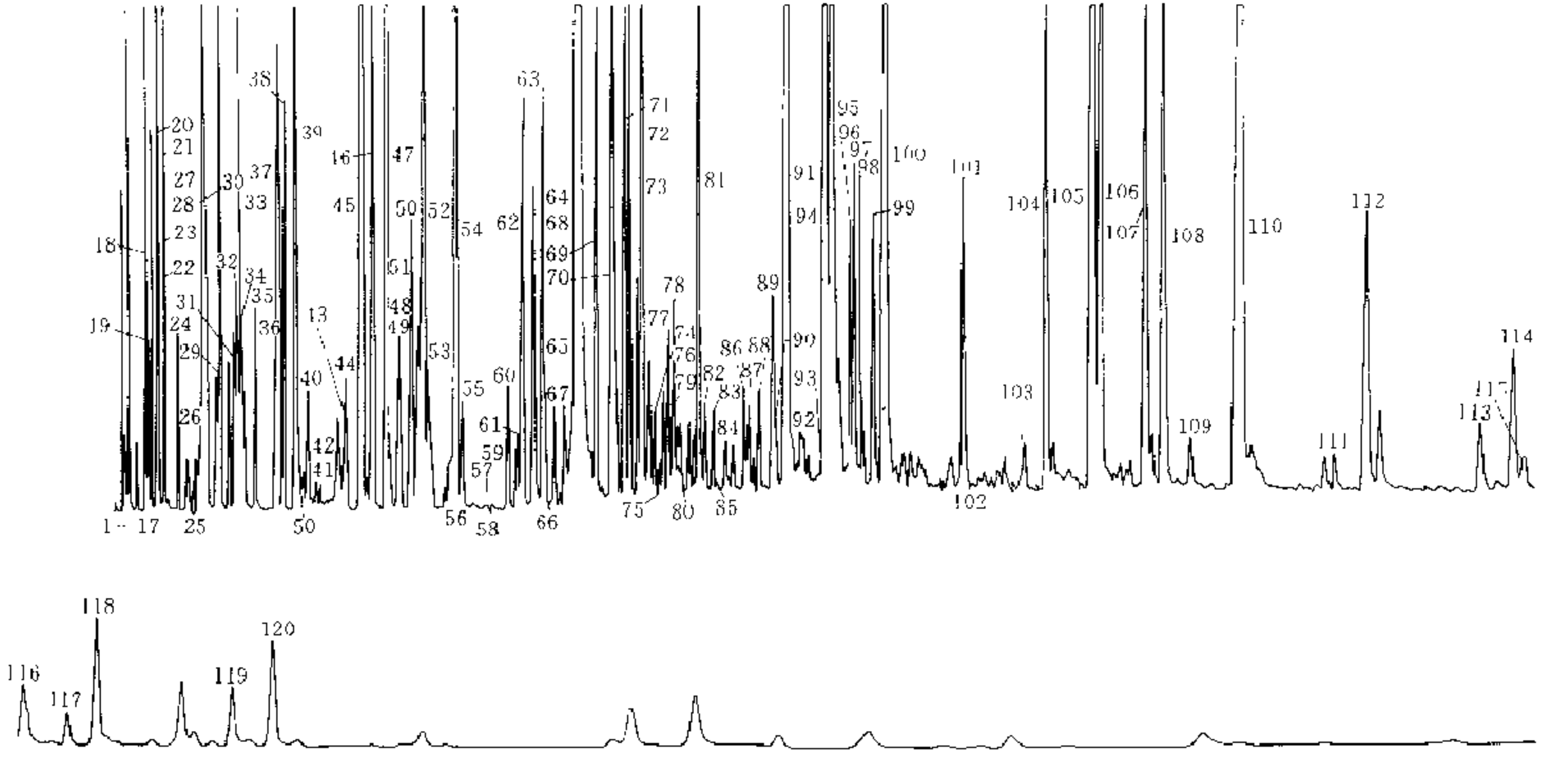


图 21-62　汽油[50]

色谱峰：1～17—气体烃；18　异戊烷；19—1-戊烯；20—2-甲基-1-丁烯；21—正戊烷；22—顺-2-戊烯；23—2-甲基-2-丁烯；24—2,2-二甲基丁烷；25—2-甲基-1,3-丁二烯；26—2-甲基-2-戊烯；27—环戊烷；28—2-甲基戊烷；29—1-己烯；30—3-甲基戊烷；31—反-2-己烯；32—顺-2-己烯；33—正己烷；34—3-己烯；35—4-甲基-2-戊烯；36—2,2,3-三甲基丁烷；37—甲基环戊烷；38—2,2-二甲基戊烷；39—苯；40—2-甲基-2-己烯；41　3-甲基-1-己烯；42—3-甲基-3-己烯；43　3,3-二甲基戊烷；44　环己烷；45—2-甲基己烷；46—2,4-二甲基戊烷；47　3-甲基己烷；48　1-反、3-二甲基环戊烷；49—1顺，3二甲基环戊烷；50　3-乙基戊烷；51—1,1-二甲基环戊烷；52—1,2二甲基环戊烷；53—2甲基-3-己烯；54—正庚烷；55—1-庚烯；56—3-庚炔；57—2,2,4-三甲基戊烷；58—3-庚烯；59—2,4,4-三甲基-1-戊烯；60—甲基环己烷；61—2,5-二甲基己烷；62　2,4二甲基己烷；63　乙基环戊烷＋1,1,3-三甲基戊烷；64　2,2,3-三甲基戊烷；65　1,2,3-三甲基环戊烷；66　2,2,3-三甲基戊烷；67　1-反，2-顺-三甲基环戊烷；68—甲苯；69—2,3,4-三甲基戊烷；70—2,3-二甲基己烷；71—2-甲基庚烷；72—4甲基庚烷；73　3-甲基，3乙基戊烷；74—2,2,4,4四甲基戊烷＋1甲基，3-乙基环戊烷；75　2-乙基-1-己烯；76—2,3二甲基己烯2＋二甲基环戊烷；77—1,3-二甲基环己烷；78—1-甲基，3-乙基环戊烷；79—1-甲基，1-乙基环戊烷；80—2,5二甲基-2,4-己二烯；81　正辛烷；82—1,2-二甲基环己烷；83—1,4二甲基环己烷；84—2,3,5-三甲基己烷；85—4,4-二甲基，3-乙基戊烯＋2,2,4-三甲基己烷；86—2,4二甲基庚烷；87—2-甲基，4-乙基己烷；88　2,6-二甲基庚烷；89—3,5-二甲基庚烷；90—1庚烯；91　乙基苯；92—2甲基，3乙基己烷；93　1,1,3-三甲基环己烷；94—间二甲苯；95—对二甲苯；96—4-乙基庚烷；97—2甲基辛烷；98　3-乙基庚烷；99—3-甲基辛烷；100—邻二甲基；101—正壬烷；102—异丙基苯；103—三甲基庚烷；104　正丙基苯；105—1甲基4乙基苯；106—1-甲基-3-乙基苯；107—1-甲基-2-乙基苯；108　1,3,5-三甲基苯；109　2甲基-5-乙基庚烷；110—1,2,4-三甲基苯；111—1-甲基3异丙基苯；112—1,2,3-三甲基苯；113—二乙基苯；114　1-甲基-3-正丙基苯；115—异丁基苯；116—1甲基4正丙基苯＋1,2二乙基苯；117　1-甲基-2-正丙基苯；118—二甲基乙基苯；119　二甲基乙基苯；120—二甲基乙基苯

色谱柱：角鲨烷，90m×0.25mm　　载　气：N_2，0.8ml・min^{-1}　　气化室温度：200℃

柱　温：室温→90℃，2℃・min^{-1}　　检测器：FID　　检测器温度：200℃

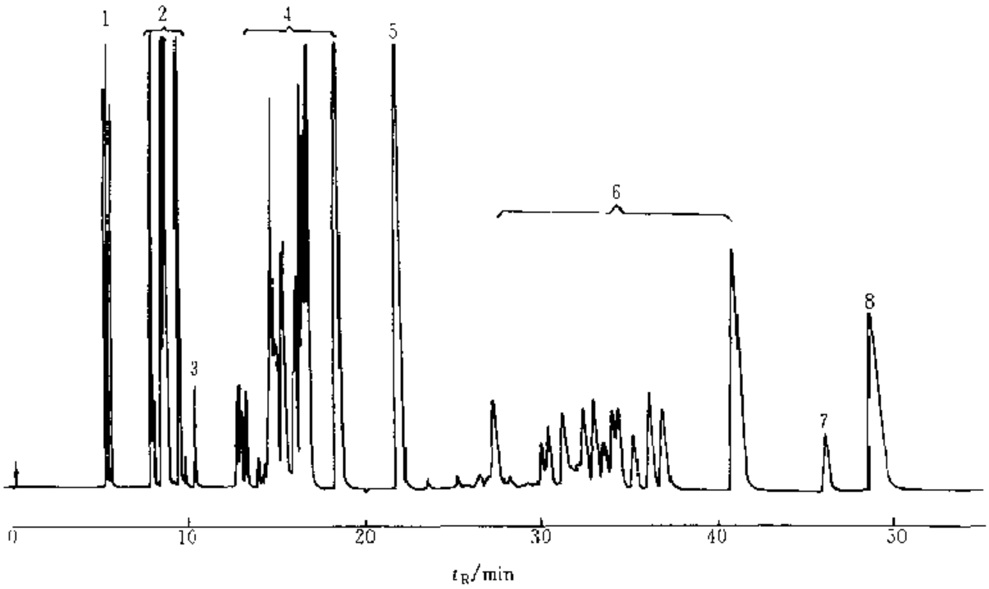


图 21-63 石脑油中的芳烃[16]

色谱峰：1—己烷；2—C_7烷烃；3—苯；4—C_8烷烃；5—甲苯；6—C_9烷烃；7—乙基苯；8—间二甲苯+对二甲苯

色谱柱：Al_2O_3 PLOT 柱，50m×0.32mm

柱 温：190℃

载 气：He，150kPa

检测器：FID

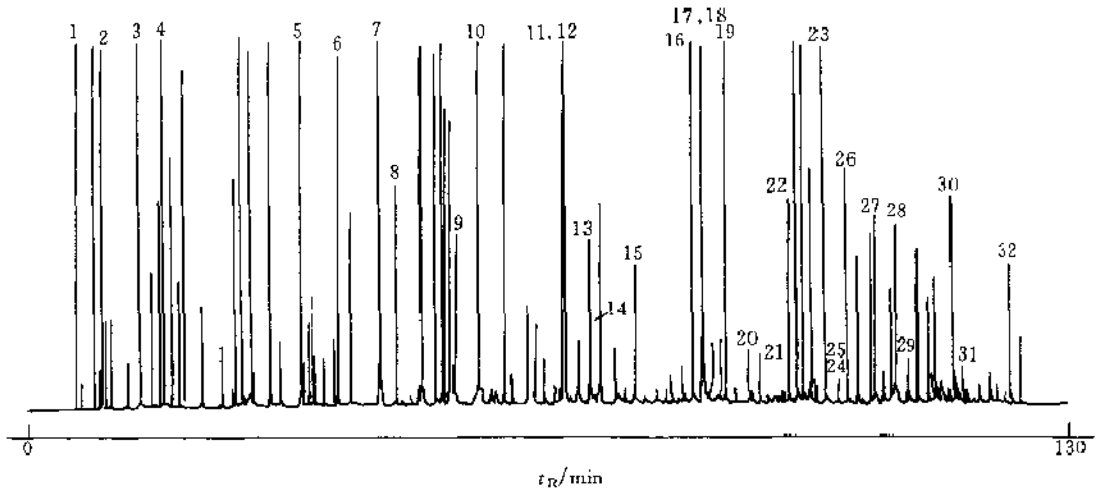


图 21-64 无铅汽油（一）[51]

色谱峰：1—甲烷；2—正丁烷；3—异戊烷；4—正戊烷；5—正己烷；6—甲基环戊烷；7—苯；8—环己烷；9—异辛烷；10—正庚烷；11—甲苯；12—2,3,3-三甲基戊烷；13—2-甲基庚烷；14—4-甲基庚烷；15—正辛烷；16—乙基苯；17—间二甲苯；18—对二甲苯；19—邻二甲苯；20—正壬烷；21—异丙基苯；22—丙基苯；23—1,2,4-三甲基苯；24—异丁基苯；25—仲丁基苯+正癸烷；26—1,2,3-三甲基苯；27—丁基苯；28—正十一烷；29—1,2,4,5-四甲基苯；30—萘；31—正十二烷；32—正十三烷

色谱柱：DB Petro 100，100m×0.25mm，d_f=0.5μm

柱 温：0℃（15min）→50℃，1℃·min^{-1}→130℃，2℃·min^{-1}→180℃（20min），4℃·min^{-1}

载 气：He，$\bar{u}$=25.6cm·s^{-1}

检测器：FID

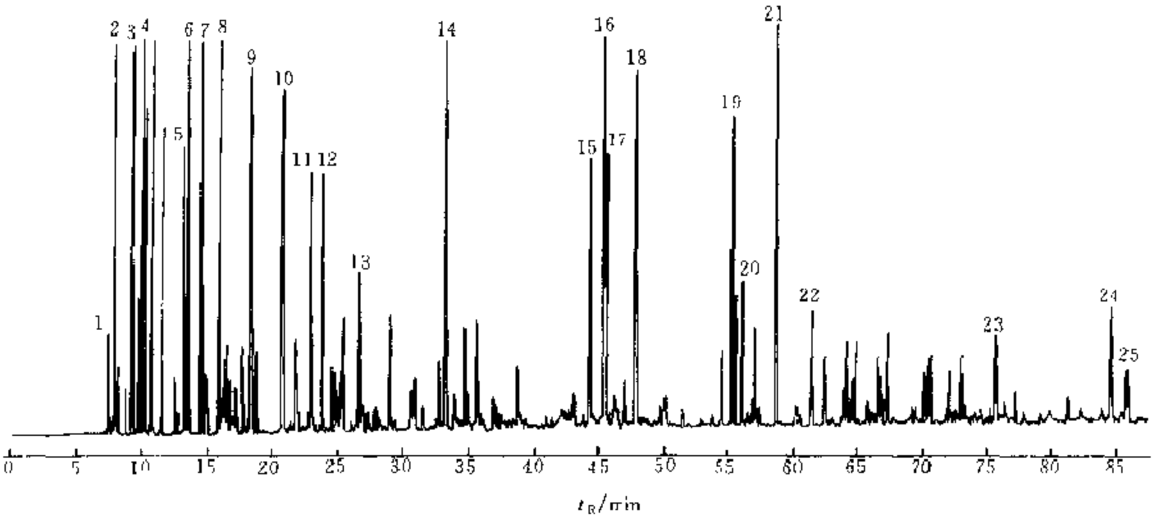
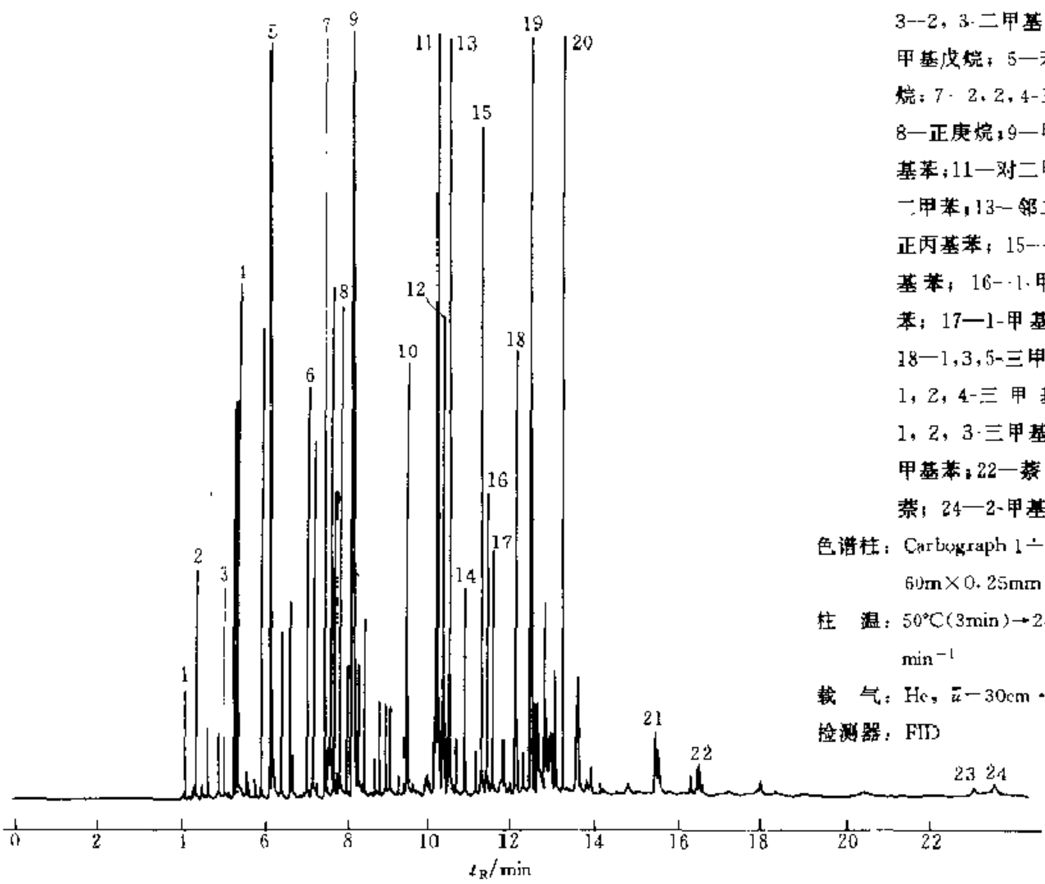


图 21-65 无铅汽油（二）[20]

色谱峰：1—异丁烷；2—正丁烷；3—异戊烷；4—正戊烷；5—2,3-二甲基丁烷；6—2-甲基戊烷；7—3-甲基戊烷；8—正己烷；9—2,4-二甲基戊烷；10—苯；11—2-甲基己烷；12—3-甲基己烷；13—正庚烷；14—甲苯；15—乙基苯；16—间二甲苯；17—对二甲苯；18—邻二甲苯；19—1-甲基-3-乙基苯；20—1,3,5-三甲基苯；21—1,2,4-三甲基苯；22—1,2,3-三甲基苯；23—萘；24—2-甲基萘；25—3-甲基萘

色谱柱：AT－Petro，100m×0.25mm，d_f=0.50μm　　载　气：He，0.65ml·min^{-1}

柱　温：35℃（15min）→200℃，2℃·min^{-1}　　检测器：FID



色谱峰：1—2-甲基丙烷；2—正戊烷；3—2,3-二甲基丁烷；4—2-甲基戊烷；5—苯；6—正己烷；7—2,2,4-三甲基戊烷；8—正庚烷；9—甲苯；10—乙基苯；11—对二甲苯；12—间二甲苯；13—邻二甲苯；14—正丙基苯；15—1-甲基-3-乙基苯；16—1-甲基-4-乙基苯；17—1-甲基-2-乙基苯；18—1,3,5-三甲基苯；19—1,2,4-三甲基苯；20—1,2,3-三甲基苯；21—四甲基苯；22—萘；23—1-甲基萘；24—2-甲基萘

色谱柱：Carbograph 1＋AT1000，60m×0.25mm

柱　温：50℃(3min)→240℃，15℃·min^{-1}

载　气：He，$\bar{u}$=30cm·s^{-1}

检测器：FID

图 21-66 无铅汽油（三）[55]

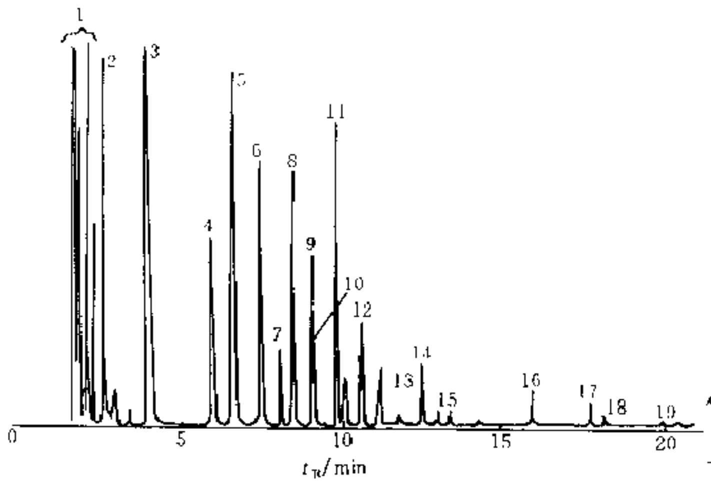


图 21-67　无铅汽油（四）[54]

色谱峰：1—烷烃；2—苯；3—甲苯；4—乙基苯；5—间二甲苯+对二甲苯；6—邻二甲苯；7—正丙基苯；8—1-甲基-4-乙基苯；9—1-甲基-3-乙基苯；10—1,3,5-三甲基苯；11—1,2,4-三甲基苯；12—1-甲基-2-乙基苯；13—1,2,3,5-四甲基苯；14—1,2,4,5-四甲基苯；15—1,2,3,4-四甲基苯；16—萘；17—2-甲基萘；18—1-甲基萘；19—二甲基萘

色谱柱：VOC，30m×0.25mm

柱　温：30℃（2min）→220℃，10℃・min^{-1}

载　气：He

检测器：MS

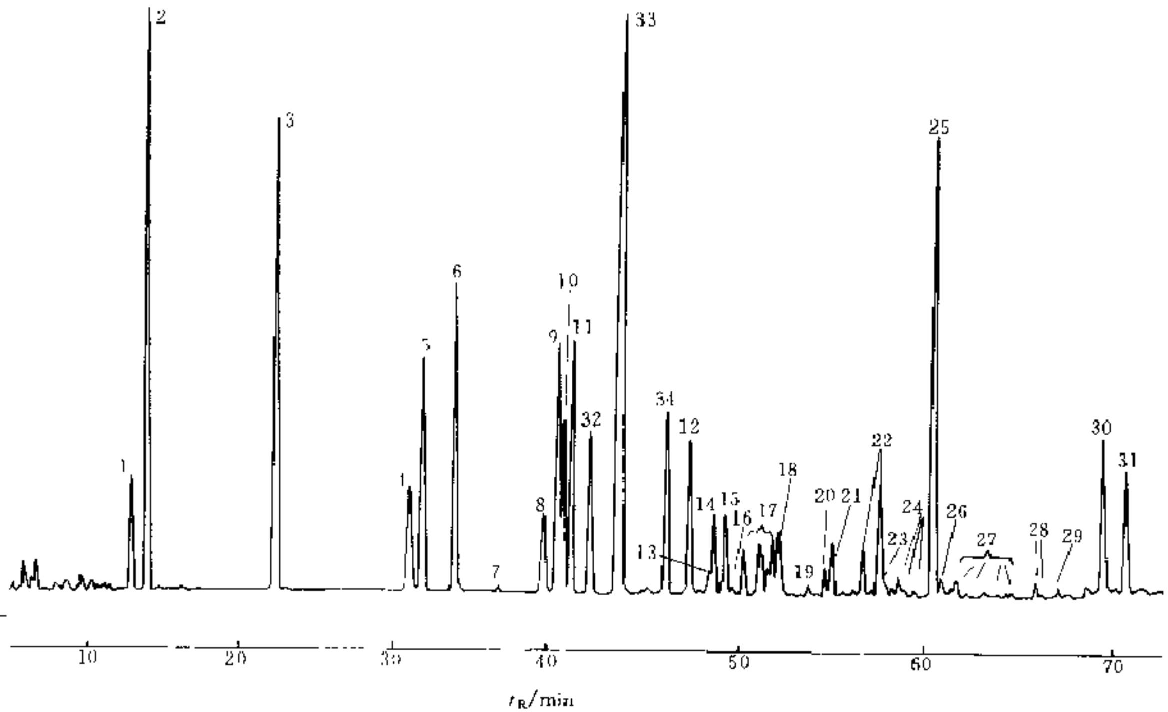


图 21-68　汽油中芳烃（一）[56]

色谱峰：1—1，2-二甲氧基乙烷（内标物）；2—苯；3—甲苯；4—乙基苯；5—间二甲苯+对二甲苯；6—邻二甲苯；7—异丙基苯；8—正丙基苯；9—1-乙基-3-甲基苯；10—1-乙基-4-甲基苯；11—1,3,5-三甲基苯；12—茚满；13—1,3-二乙基苯；14—1-甲基-3-正丙基苯；15—1,4-二乙基苯+正丁基苯；16—1,2-二乙基苯；17—C_4-苯；18，22—C_1-茚满；19—1,2-二甲基-3-乙基苯；20—1,2,4,5-四甲基苯；21—1,2,3,5-四甲基苯；23—1,2,3,4-四甲基苯；24，27—C_5-苯；25—萘；26，29—C_2-茚满；28—C_6-苯；30—2-甲基萘；31—1-甲基萘；32—1-乙基-2-甲基苯；33—1,2,4-三甲基苯；34—1,2,3-三甲基苯

色谱柱：HP-1，60m×0.53mm，d_f=5.0μm

柱　温：40℃→190℃，2℃・min^{-1}→300℃，30℃・min^{-1}

载　气：H_2

检测器：FT-IR

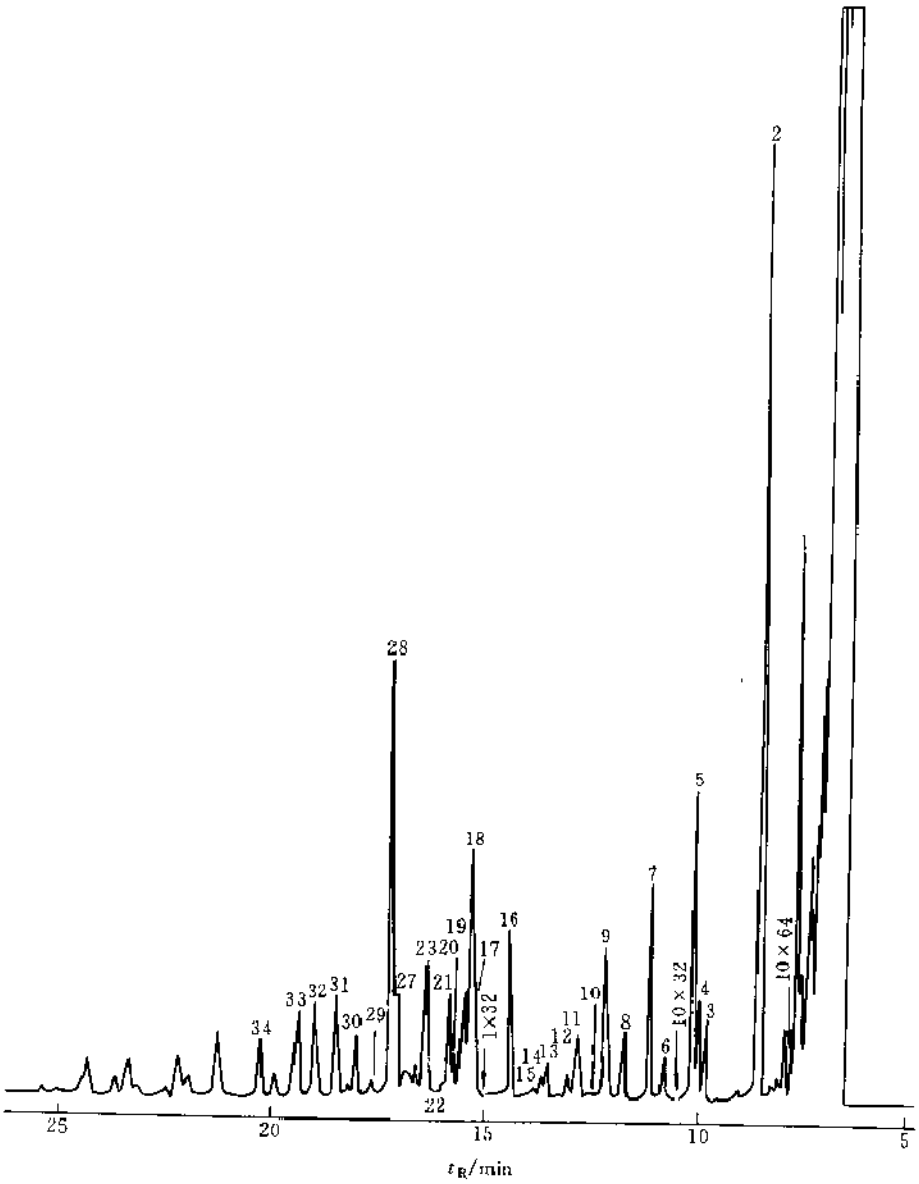


图 21-69　汽油中芳烃（二）[57]

色谱峰：1—苯；2—甲苯；3—乙基苯；4—对二甲基苯；5—间二甲基苯；6—异丙基苯；7—邻二甲基苯；8—正丙基苯；9—1-甲基-3-乙基苯+1-甲基-4-乙基苯；10—叔丁基苯；11—1,3,5-三甲基苯；12—仲丁基苯；13—1-甲基-2-乙基苯；14—1-甲基-3-异丙基苯；15—1-甲基-4-异丙基苯；16—1,2,4-三甲基苯；17—1,3-二乙基苯；18—1-甲基-2-异丙基苯+1-甲基-3-正丙基苯；19—1-甲基-4-正丙基苯；20—1,4-二乙基苯；21—正丁基苯；22—C_{11}烷基芳烃；23—1,3-二甲基-5-乙基苯；24—C_{11}烷基芳烃；25—1,2-二乙基苯；26—C_{11}烷基芳烃；27—1-甲基-2-正丙基苯+C_{11}烷基芳烃；28—1,2,3-三甲基苯；29—C_{11}烷基芳烃；30—1,4-二甲基-2-乙基苯；31—1,3-二甲基-4-乙基苯；32—1,2-二甲基-4-乙基苯；33—萘；34—1,3-二甲基-2-乙基苯

色谱柱：Carbowax1540，91.4m×0.25mm

柱　温：100℃

载　气：H_2，1.5ml·min^{-1}

检测器：FID

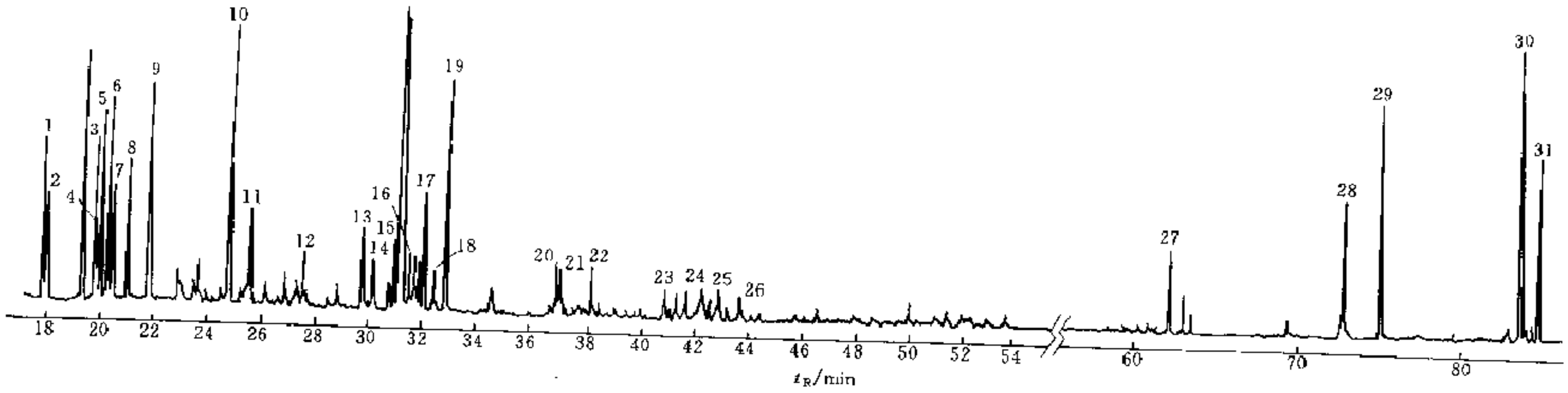


图 21-70　无铅汽油中烯烃[52]

色谱峰：1 -2-甲基-1-戊烯；2 -1-己烯；3—2-或 3-已烯；4--4-甲基环戊烯；5—2 或 3 己烯；6—4-甲基-2-戊烯；7 -3 甲基-2-戊烯；8—2-或 3-己烯；9—3-甲基-2-戊烯；10- 1 甲

基环戊烯；11 -4-亚甲基庚烷；12 —环己烯；13—2,5-二甲基-1-己烯；14--3-辛烯；15— 4,4 二甲基环戊烯；16—2 或 3-甲基-2-或 3 己烯；17 -3,3-二甲基-1,4-戊二烯；

18—4-甲基-2-己烯；19— 4-辛烯（?）；20—1,5-二甲基环戊烯；21— 3-乙基环戊烯；22—1-甲基环己烯；23--1-辛烯；24--2,3,4-三甲基-1,4-戊二烯；25—2,5-二甲基-3-

己烯；26—2-甲基-3 庚烯；27--1-乙基-2-甲基苯；28- 2,3-二氢-4-甲基茚（?）；29—萘；30—1-甲基萘；31- 2-甲基萘

色谱柱：Ultra1，50m×0.20mm，d_f=0.33μm

柱　温：−10℃（10min）→240℃，2℃·min^{-1}

载　气：He，$\bar{u}$=28cm·s^{-1}（110℃）

检测器：MS

气化室温度：15℃

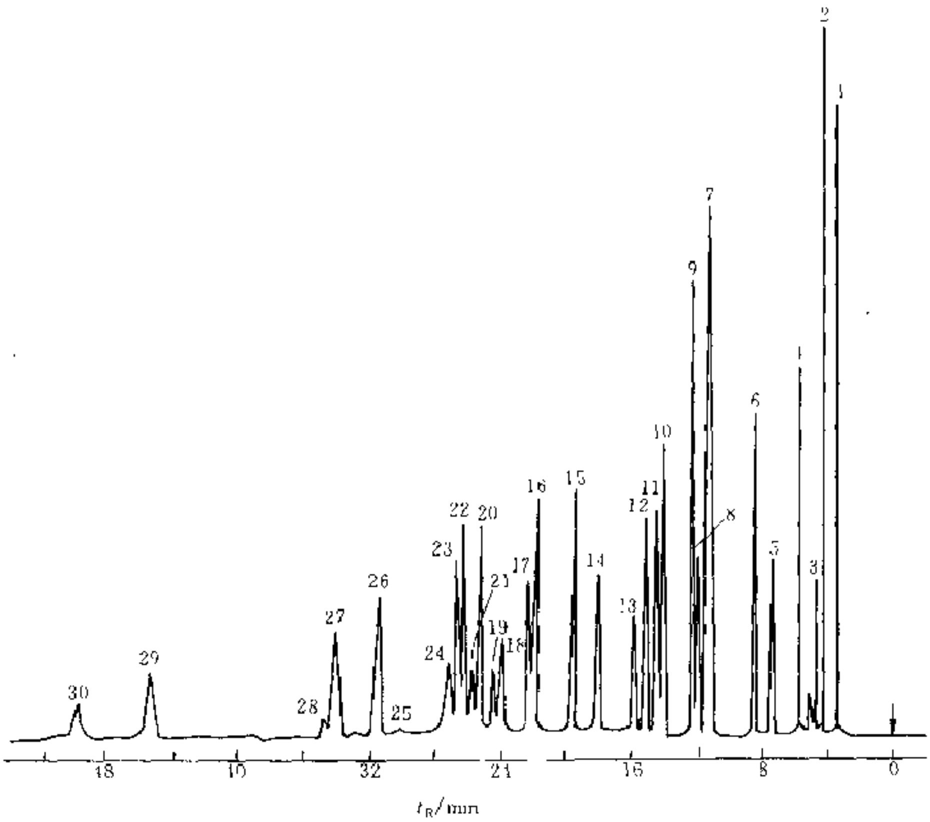


图 21-71 热裂解汽油的芳烃[39]

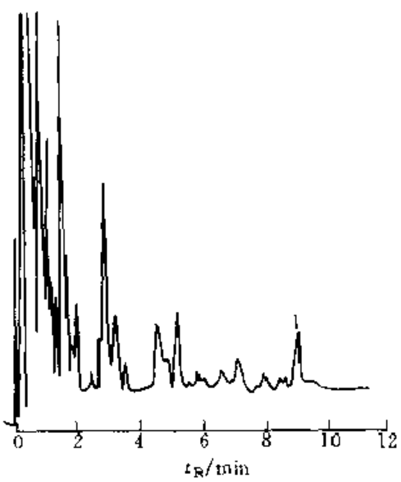
色谱峰：1—正己烷；2—正庚烷；3—苯；4—正辛烷；5—甲苯；6—正壬烷；7—乙基苯；8—对二甲苯；9—间二甲苯；10—邻二甲苯；11—正癸烷；12—异丙基苯；13—苯乙烯；14—正丙基苯；15—间，对甲基乙基苯；16—1,3,5-三甲基苯；17—叔丁基苯；18—异丁基苯；19—仲丁基苯；20—1,2,4-三甲基苯；21—α-甲基苯乙烯；22—正十一烷；23—1,3-甲基异丙基苯；24—1,4-甲基异丙基苯；25—1,2 甲基异丙基苯；26—1,2,3 三甲基苯；27—正丁基苯；28—茚满；29—茚；30—正十二烷

色谱柱：Ucon LB 55X，106m×0.24mm（内壁用四氯化碳在 400°C 处理 6h）

载 气：H_2，4.9ml・min^{-1}

检测器：FID

柱 温：90°C



色谱峰：1—四乙基铅

色谱柱：1.5%OV-101，Chromosorb G(0.25mm～0.177mm)，1m×3mm

柱 温：70°C→200°C，3°C・min^{-1}

载 气：N_2，40 ml・min^{-1}

检测器：表面发射火焰光度计

气化室温度：250°C

检测器温度：100°C

图 21-72 汽油中四乙基铅[58]

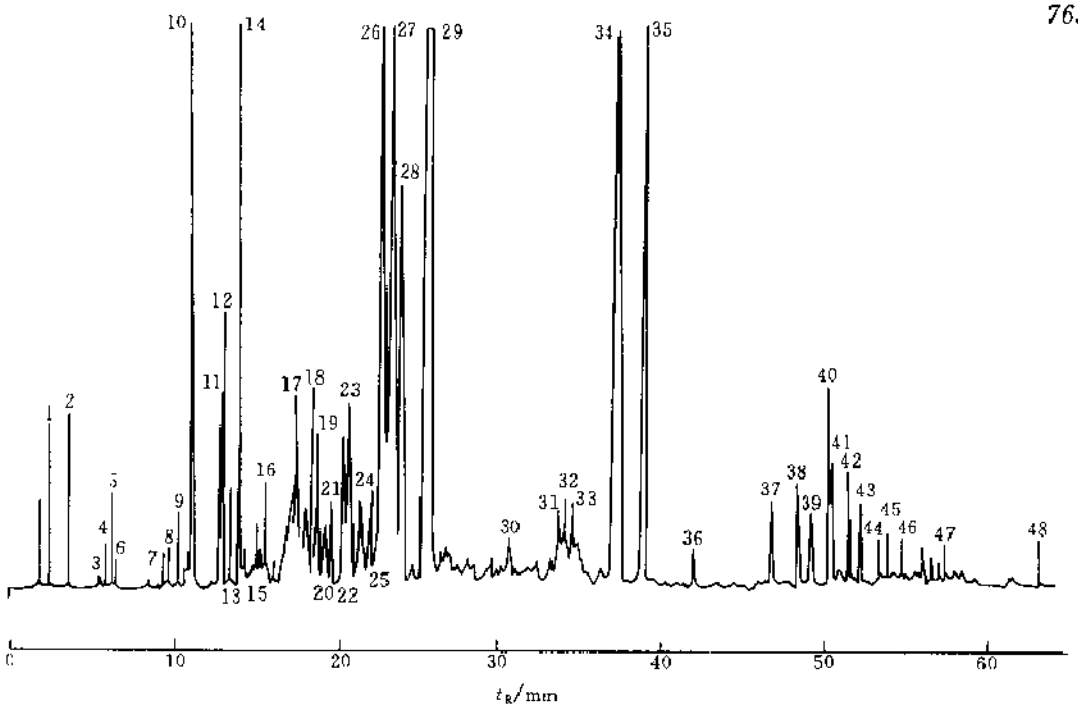


图 21-73 裂解柴油[53]

色谱峰：1 苯；2 甲苯；3—乙苯；4—间二甲苯；5—苯乙烯；6—邻二甲苯；7，8—三甲苯；9—甲基苯乙烯；10—丙烯基苯；11—甲基苯乙烯；12—甲基乙基苯；13—2,3 二氢茚；14—茚；15—对甲基丙基苯；16—四甲苯；17—二乙基苯；18—乙基苯乙烯；19—二甲基苯乙烯；20 甲基异丙苯；21—二乙烯基苯；22～24—二甲基苯乙烯；25—乙基苯乙烯；26～28—甲基茚；29—萘；30—十二烷；31～33—甲基二氢萘；34—β-甲基萘；35—α-甲基萘；36—十三烷；37—联苯；38—乙基萘；39～43—二甲萘；44—甲基联苯；45—甲基乙基萘；46—三甲萘；47—芴；48—菲

色谱柱：BP-1，25m×0.32，d_f=0.5μm　　柱　温：65℃（4min）→110℃，1℃·min^{-1}→220℃，5℃·min^{-1}

载　气：N_2，1.47 ml·min^{-1}，分流比＝86：1　　检测器：FID

气化室温度：280℃　　检测器温度：300℃

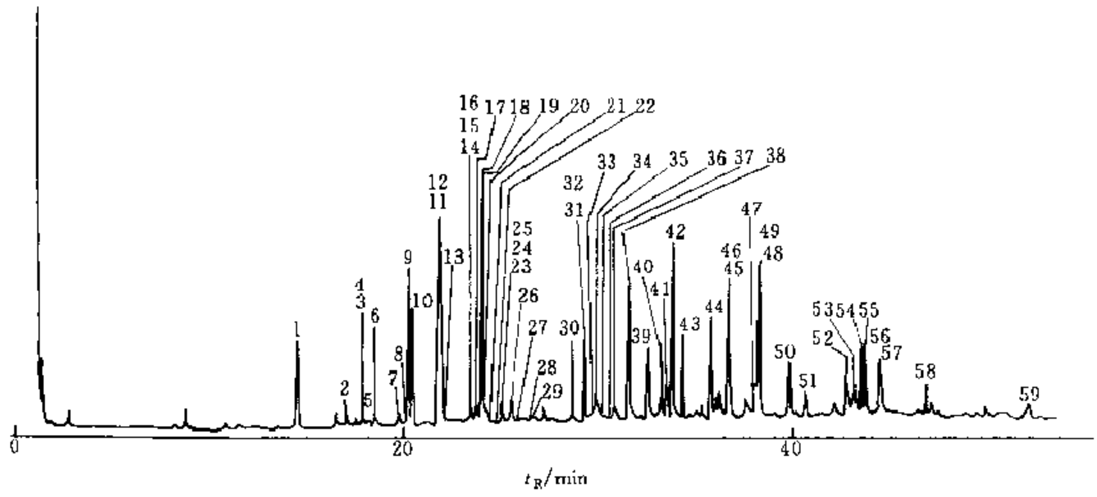
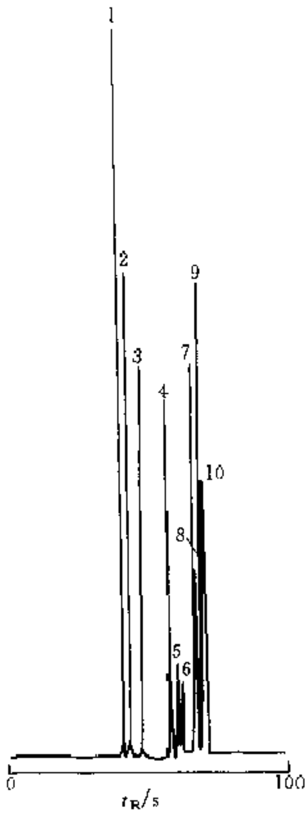


图 21-74 柴油中的含氧多环芳烃[42]

色谱峰：1 9-芴酮；2—甲基-9-芴酮；3—甲基-9-芴酮；4—苊酮；5—甲基-9-芴酮；6—1-芬那烯-1-酮；7—甲基-9-芴酮；8—甲基-9-芴酮；9—蒽酮；10—苯二酸酯；11—1，8-萘羧酸酐；12—4-*H*-环五［*def*］-菲-4-酮；13—荧蒽；14—2-硝基芴；15—甲基蒽醌；16—芘；17—菲醛；18—蒽醛；19—甲基-4-*H*-环五（*def*）-菲-4-酮；20—9-硝基蒽；21，24，27，39，44，51，53，55，58—未知物；22—甲基-4-*H*-环五［*def*］-菲-4-酮；23—菲-9，10-醌；25—甲基-4-*H*-环五［*def*］-菲-4-酮；26—甲基-4-*H*-环五（*def*）-菲-4-酮；28—甲基-9-硝基蒽；29—多环芳烃香豆素；30—苯并芴酮；31—苯并芴酮；32—4，4′-二硝基联苯（内标物）；33—苯并芴酮；34—苯并芴酮；35—苯并芴酮；36—苯并芴酮；37—䓛；38—7-*H*-苯并-［*de*］蒽-7-酮；40—苯二酸酯；41—苯并［*a*］蒽 7,12-二酮；42 1 硝基芘；43—β,β'-联萘（内标物）；45—苯并［*b*］芴蒽；46—苯并芘酮；47—苯并［*e*］芘；48—6-*H*-苯并［*cd*］芘-6-酮；49—苯并［*a*］芘；50—苯并芘酮；52—1,12-芘羧酸酐；54—茚并［*cd*］芘；56—苯并［*ghi*］苝；57—6-硝基苯并［*a*］芘；59—晕苯

色谱柱：SE-54，25m×0.3mm　　柱　温：100℃（1min）→280℃（10min），4℃·min^{-1}

载　气：H_2　　检测器：FID



色谱峰：1—苯；2—癸烷；3—甲苯；4—乙基苯；5—对二甲苯；6—间二甲苯；7—正丙基苯；8—十二烷；9—邻二甲苯；10—苯甲醛

色谱柱：CP-Wax52CB，25m×0.25mm，d_f=0.2μm

柱　温：100°C

载　气：H_2，63cm·s^{-1}

图 21-75　烷烃与芳烃[37]

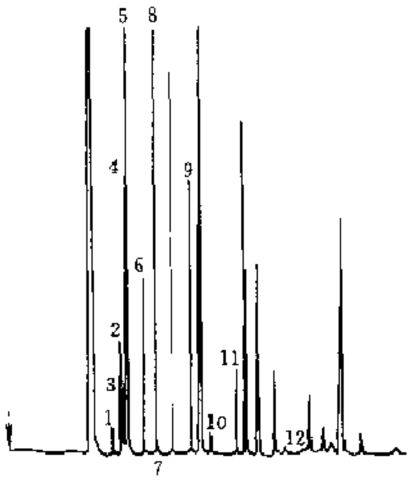


图 21-76　汽油中的芳烃和醇[30]

色谱峰：1—十一烷；2—叔丁醇；3—甲醇；4—2-丙醇；5—苯；6—乙醇；7—2-丁醇；8—甲苯；9—乙基苯；10—1-丁醇；11—丙基苯；12—丁基苯

色谱柱：1，2，3 三（2-氰乙氧基）丙烷，50m×0.22mm，d_f=0.4μm

柱　温：78°C

载　气：He，$\bar{u}$=26cm·s^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250°C

检测器温度：250°C

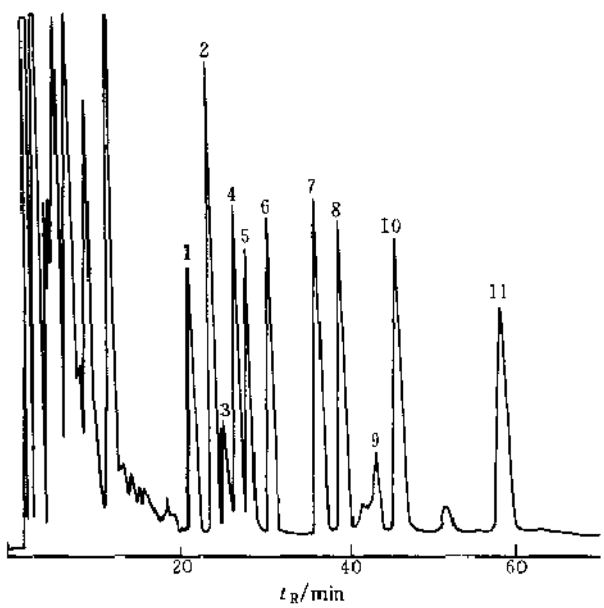


图 21-77　汽油中低沸点醇[31]

色谱峰：1—苯；2—2-甲基-2-丙醇；3—甲醇；4—2-丙醇；5—乙醇；6—甲苯；7—2-丁醇；8—正丙醇；9—二甲苯+乙基苯；10—2-甲基-1-丙醇；11—正丁醇

色谱柱：20% PEG-400，Chromosorb W AW（80 目～100 目），5.08m×3mm

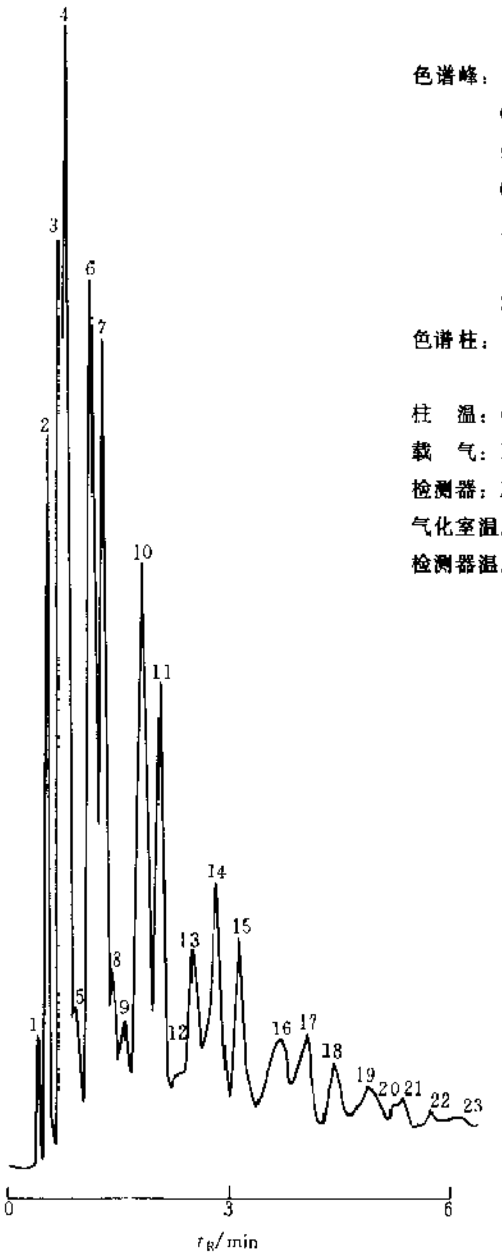
柱　温：50°C (5min) →90°C (10min)，3°C·min^{-1}→100°C (40min)，3°C·min^{-1}

载　气：He，35ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250°C

检测器温度：250°C



色谱峰：1—C_4烷+C_4烯；2—C_5烷；3—C_5环烷；4—C_6烷；5—C_6环烷；6—C_7烷；7，8—C_7环烷；9，10—C_8烷；11，12—C_8环烷；13—C_9烷；14—C_9环烷；15—苯；16—甲苯；17—乙基苯+间二甲苯+对二甲苯；18—异丙基苯；19—邻二甲苯；20—正丙基苯；21—1-甲基-3-乙基苯；22—异丁基苯；23—1,3,5-三甲基苯

色谱柱：10% OV-275，5A 分子筛（80 目～100 目）1.80m×2.3mm

柱　温：60℃→130℃，10℃·min^{-1}

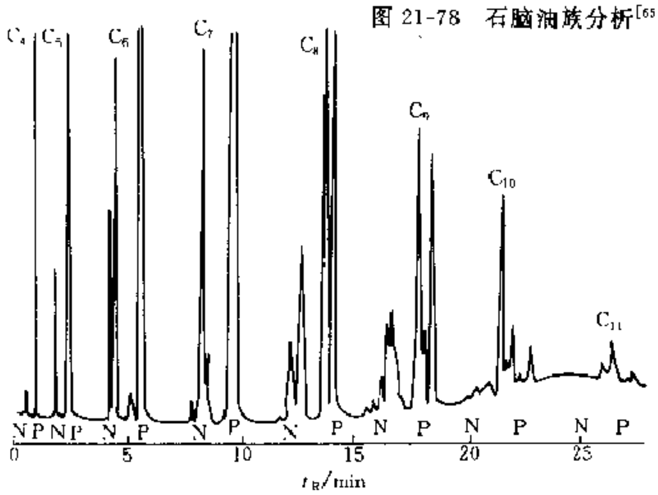
载　气：He，25ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：170℃

检测器温度：180℃

图 21-78　石脑油族分析[65]



色谱峰：组分名称见色谱图，其中 N 为环烷烃，P 为链烷烃

色谱柱：13X分子筛 PLOT 柱，10m×0.5mm

柱　温：150℃→380℃，10℃·min^{-1}

载　气：N_2，12kPa

检测器：FID

图 21-79　C_4～C_{11}环烷烃与链烷烃[67]

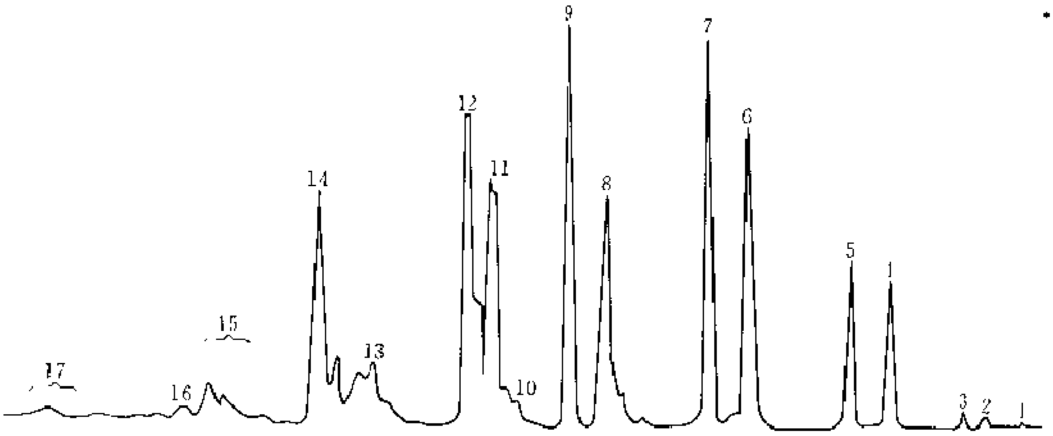


图 21-80 重整原料油的 PNA 分析[66]

色谱峰：1—C_4 烷；2—C_5 环烷；3—C_5 烷；4—C_6 环烷；5—C_6 烷；6—C_7 环烷；7—C_7 烷；8—C_8 环烷；9—C_8 烷；10—萘；11—C_9 环烷；12—C_9 烷；13—甲萘+C_{10}环烷；14—C_{10}烷；15—二甲基萘+C_{11}环烷；16—正十一烷；17—C_6 芳烃

色谱柱：CoNaX 分子筛涂于 101 担体（40 目～60 目），2m×4mm　　柱　温：150℃→396℃，5℃・min^{-1}

载　气：H_2，60～80ml・min^{-1}　　检测器：FID

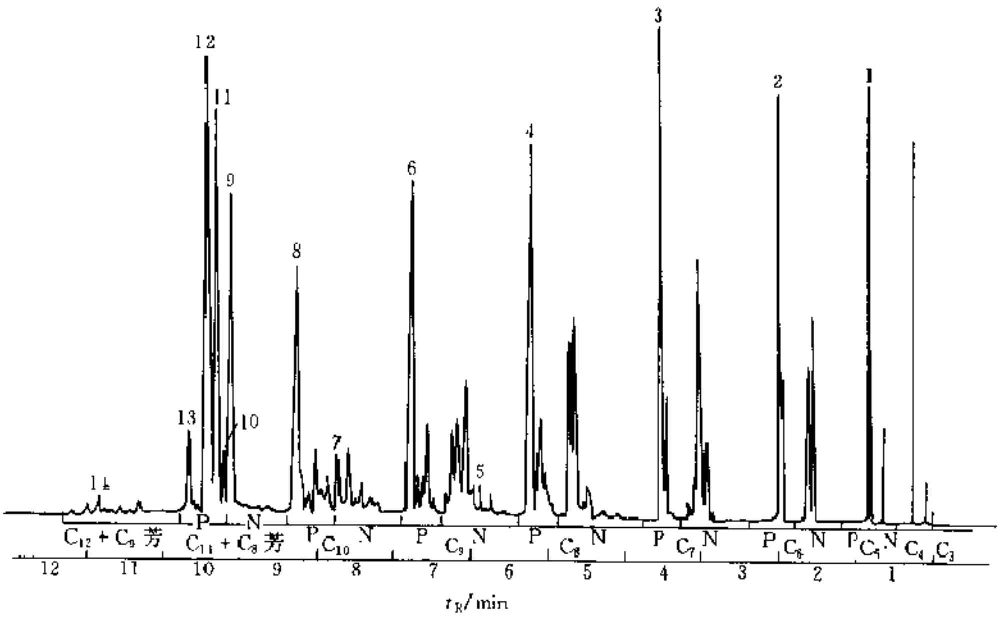


图 21-81 大庆直馏汽油及芳烃[68]

色谱峰：1—正戊烷；2—正己烷；3—正庚烷；4—正辛烷；5—苯；6—正壬烷；7—甲苯；8—正癸烷；9—乙基苯；10—间二甲苯；11—对二甲苯；12—邻二甲苯；13—正十一烷；14—正十二烷

色谱柱：分子筛 PLOT 柱，6m×0.35mm　　检测器：FID

柱　温：起始 160℃，升温速度 20℃・min^{-1}　　气化室温度：300℃

载　气：H_2，5ml・min^{-1}　　检测器温度：160℃

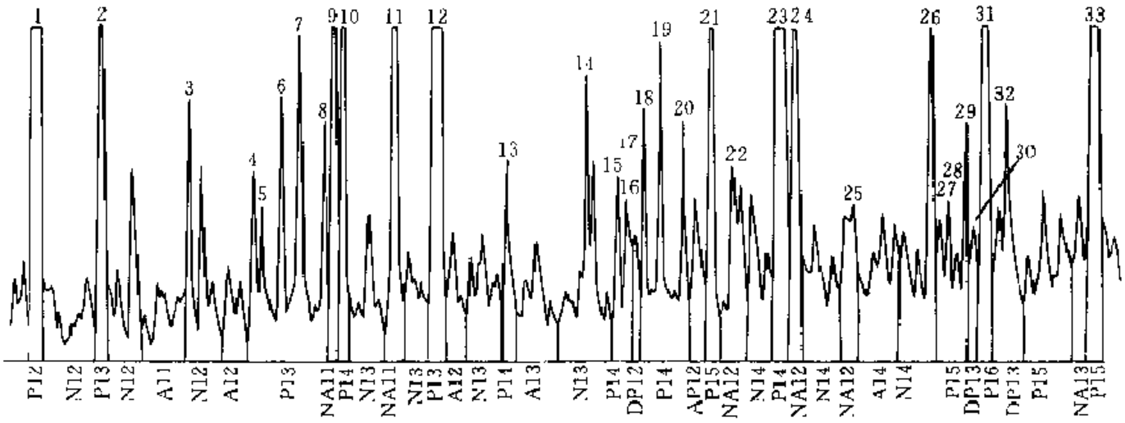


图 21-82 C_{11}～C_{16}烃族分析[69]

色谱峰：1—正十二烷；2—2,6-二甲基十一烷；3—正己基环己烷；4—2,5-二甲基十一烷；5—5-甲基十二烷；6—4-甲基十二烷；7—2-甲基十二烷；8—3-甲基十二烷；9—2-甲基萘；10—2,6,10-三甲基十一烷；11—1-甲基萘；12—正十三烷；13—6-二甲基十二烷；14—正庚基环己烷；15—2,5-二甲基十二烷；16—5-甲基十三烷；17—联苯；18—4-甲基十三烷；19—2-甲基十三烷；20—3-甲基十三烷；21—2,6,10-三甲基十二烷；22—乙基萘；23—正十四烷；24，25—二甲基萘；26—正辛基环己烷；27—5-甲基十四烷；28—4-甲基十四烷；29—2-甲基十四烷；30—甲基联苯；31—2,6,10-三甲基十三烷；32—甲基联苯；33—正十五烷

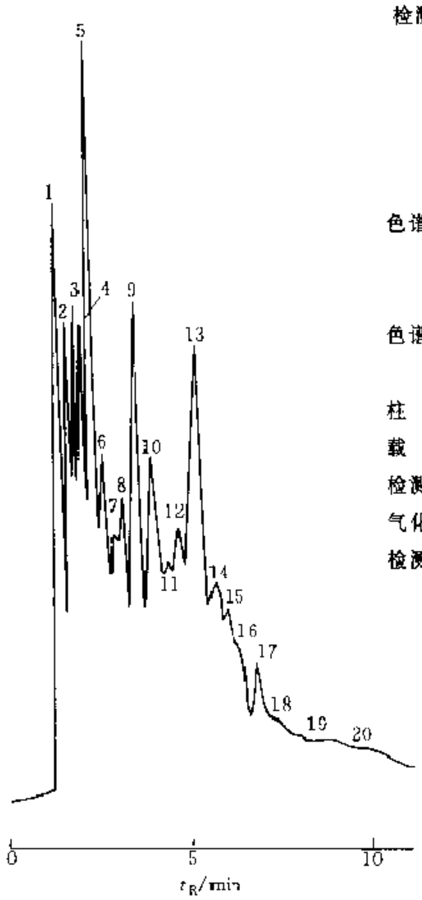
注：色谱图横坐标下：P—烷烃；N—环烷烃；A—芳烃；NA—萘；DP—联苯；其后的数字表示组分的碳数

色谱柱：OV-1，50m×0.2mm，d_f=0.52μm

柱　温：35℃（101min）→114℃，1.1℃·min^{-1}→280℃，1.7℃·min^{-1}

载　气：He，1.2ml·min^{-1}　　　　气化室温度：300℃

检测器：FID　　　　检测器温度：300℃



色谱峰：1—C_{10}链烷；2—C_{10}环烷；3—C_{11}链烷；4—C_{11}环烷；5—C_{12}链烷；6、7—C_{12}环烷；8—C_{13}链烷；9—C_{13}环烷；10—C_{14}链烷；11、12—C_{14}环烷；13～20—芳烃

色谱柱：10%OV-275，5A分子筛(80目～100目)，1.80m×2.3mm

柱　温：110℃→180℃，5℃·min^{-1}

载　气：He，25ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：260℃

检测器温度：270℃

图 21-83 煤油族分析[65]

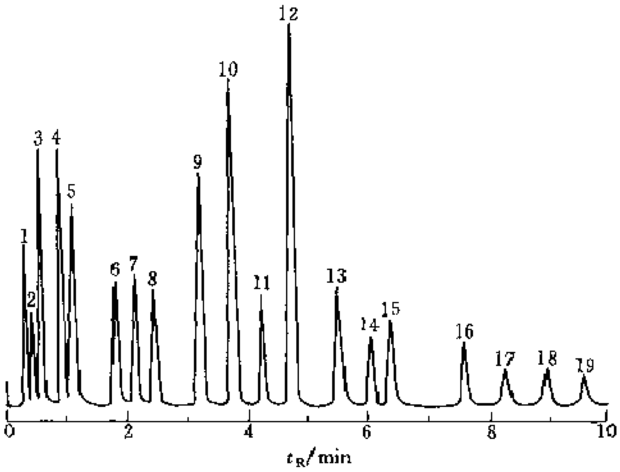


图 21-84 模拟蒸馏——ASTM D3710[70]

色谱峰：1—丙烷；2—异丁烷；3—正丁烷；4—异戊烷；5—正戊烷；6—2-甲基戊烷；7—正己烷；8—2,4-二甲基戊烷；9—正庚烷；10—甲苯；11—正辛烷；12—对二甲苯；13—正丙基苯；14—正癸烷；15—正丁基苯；16—正十二烷；17—正十三烷；18—正十四烷；19—正十五烷

色谱柱：Petrocol A，0.41m×3mm

柱 温：−20℃→200℃，20℃·min⁻¹

载 气：He，25ml·min⁻¹

检测器：FID

气化室温度：300℃

检测器温度：300℃

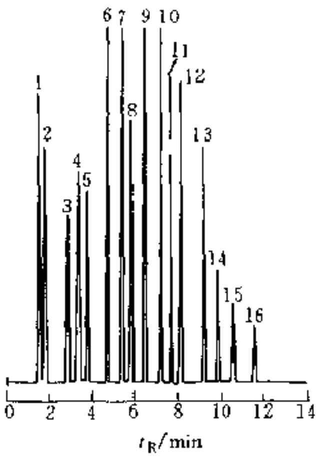


图 21-85 模拟蒸馏——ASTM D3710[20]

色谱峰：1—2-甲基丁烷；2—正戊烷；3—2-甲基戊烷；4—正己烷；5—2,4-二甲基戊烷；6—正庚烷；7—甲苯；8—正辛烷；9—对二甲苯；10—正丙基苯；11—正癸烷；12—正丁基苯；13—正十二烷；14—正十三烷；15—正十四烷；16—正十五烷

色谱柱：AT-3710，15m×0.53mm

柱 温：31℃（2min）→200℃，20℃·min⁻¹

载 气：He，8ml·min⁻¹

检测器：FID

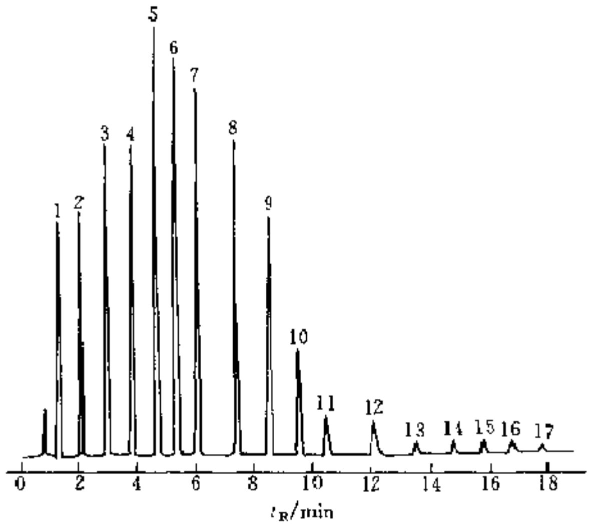


图 21-86 模拟蒸馏——ASTM D2887[70]

色谱峰：1—n-C_6；2—n-C_7；3—n-C_8；4—n-C_9；5—n-C_{10}；6—n-C_{11}；7—n-C_{12}；8—n-C_{14}；9—n-C_{16}；10—n-C_{18}；11—n-C_{20}；12—n-C_{24}；13—n-C_{28}；14—n-C_{32}；15—n-C_{36}；16—n-C_{40}；17—n-C_{44}

色谱柱：Petrocol 2887，5m×0.53mm，d_f=0.5μm

柱 温：−20℃→320℃（5min），20℃·min⁻¹

载 气：N_2，6ml·min⁻¹

气化室温度：350℃

检测器：FID

检测器温度：350℃

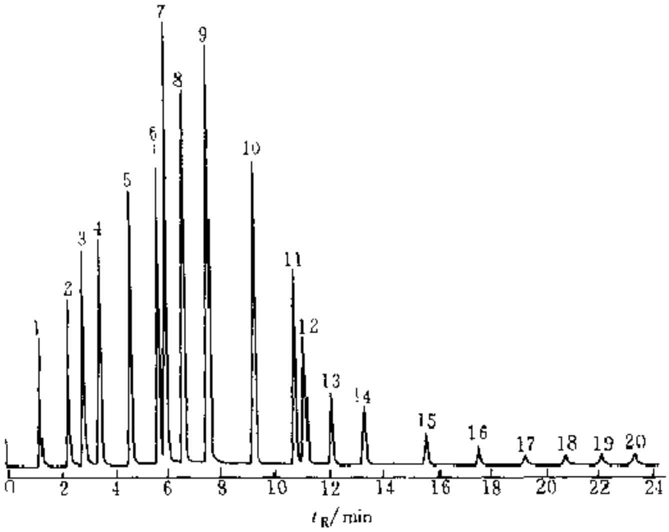


图 21-87 模拟蒸馏 — ASTM D2887[72]

色谱峰：1—正己烷；2—正庚烷；3—甲苯；4—正辛烷；5—正壬烷；6—正癸烷；7—正十一烷；8—正丁基苯；9—正十二烷；10—正十四烷；11—正十六烷；12—正癸基苯；13—正十八烷；14—正二十烷；15—正二十四烷；16—正二十八烷；17—正三十二烷；18—正三十六烷；19—正四十烷；20—正四十四烷

色谱柱：甲基硅氧烷，Chromosorb，0.41m×3mm（Petrocol B 填充柱）

柱　温：-25℃→350℃，15℃·min⁻¹

载　气：He，30ml·min⁻¹

检测器：FID

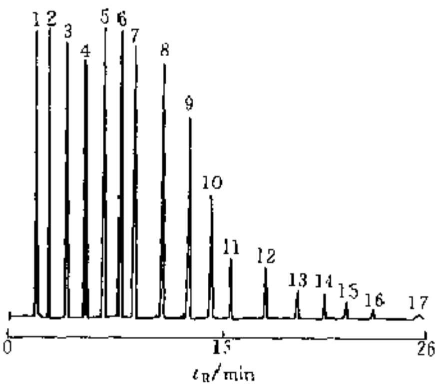


图 21-88 模拟蒸馏——ASTM D2887[29]

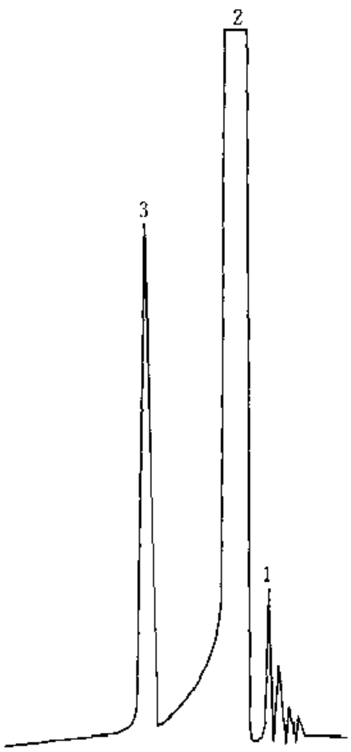
色谱峰：1—正己烷；2—正庚烷；3—正辛烷；4—正壬烷；5—正癸烷；6—正十一烷；7—正十二烷；8—正十四烷；9—正十六烷；10—正十八烷；11—正二十烷；12—正二十四烷；13—正二十八烷；14—正三十二烷；15—正三十六烷；16—正四十烷；17—正四十四烷

色谱柱：AT-2887，10m×0.53mm

柱　温：35℃(1min)→340℃，15℃·min⁻¹

载　气：He，8ml·min⁻¹

检测器：FID



色谱峰：1—C_5～C_6烃；2—苯；3—甲苯

色谱柱：有机皂土：苯二甲酸二壬酯：6201 担体＝3：25：100，3m×4mm

柱　温：90℃

载　气：N_2，40ml·min⁻¹

检测器：FID

气化室温度：200℃

检测器温度：180℃

图 21-89 工业乙酸锑中甲苯[73]

第三节　重油与蜡色谱图

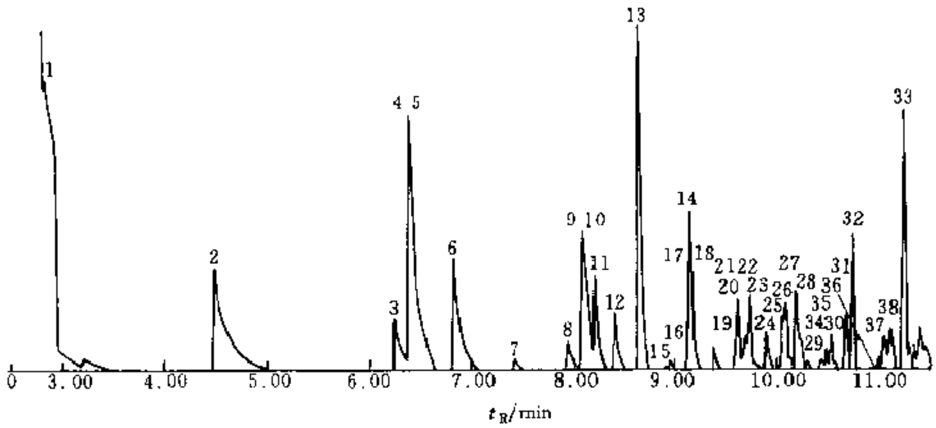


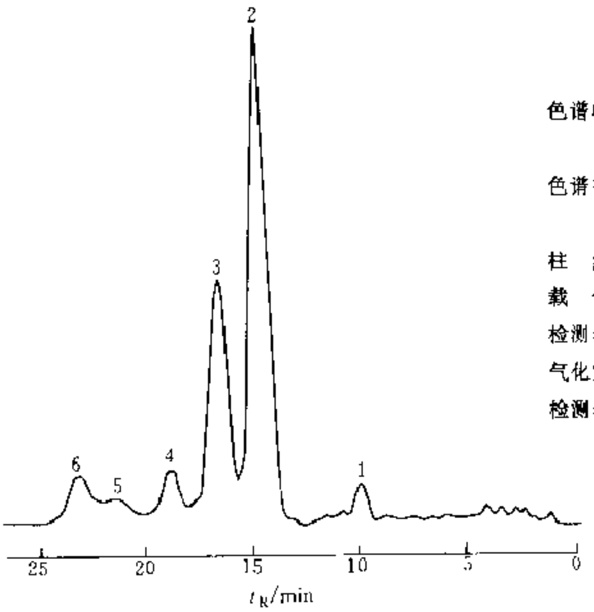
图 21-90　原油中烷基苯（C_6～C_{11}）[73]

色谱峰：1—苯；2—甲苯；3—乙基苯；4—间二甲苯；5—对二甲苯；6—邻二甲苯；7—异丙基苯；8—正丙基苯；9—1-乙基-3-甲基苯；10—1-乙基-4-甲基苯；11—1,3,5-三甲基苯；12—1-乙基-2-甲基苯；13—1,2,4-三甲基苯；14—1,2,3-三甲基苯；15—异丁基苯；16—仲丁基苯；17—间异丙基苯甲烷；18—对异丙基苯甲烷；19—1,3-二乙基苯；20—1-甲基-3-丙基苯；21—1-甲基-4-丙基苯；22—正丁基苯；23—1-乙基-3,5-二甲基苯；24—1,2-二乙基苯；25—1-甲基-2-丙基苯；26—1-乙基-2,4-二甲基苯；27—2-乙基-1,4-二甲基苯；28—4-乙基-1,2-二甲基苯；29—2-乙基-1,3-二甲基苯；30—1-乙基-2,3-二甲基苯；31—1,2,4,5-四甲基苯；32—1,2,3,5-四甲基苯；33—1,2,3,4-四甲基苯；34～38—C_5 苯

色谱柱：HP-5，30m×0.25mm，d_f=0.25μm　　检测器：MS

柱　温：35℃（2min）→300℃（10min），10℃·min⁻¹　　气化室温度：290℃

载　气：He，1ml·min⁻¹



色谱峰：1—萘；2—β-甲基萘；3—α-甲基萘；4—喹啉；5—异喹啉；6—联苯

色谱柱：10% Carbowax 20M，上海试剂厂 101 担体（60 目～80 目），4m×3mm

柱　温：176℃

载　气：H_2

检测器：TCD

气化室温度：260℃

检测器温度：176℃

图 21-91　工业甲基萘[74]

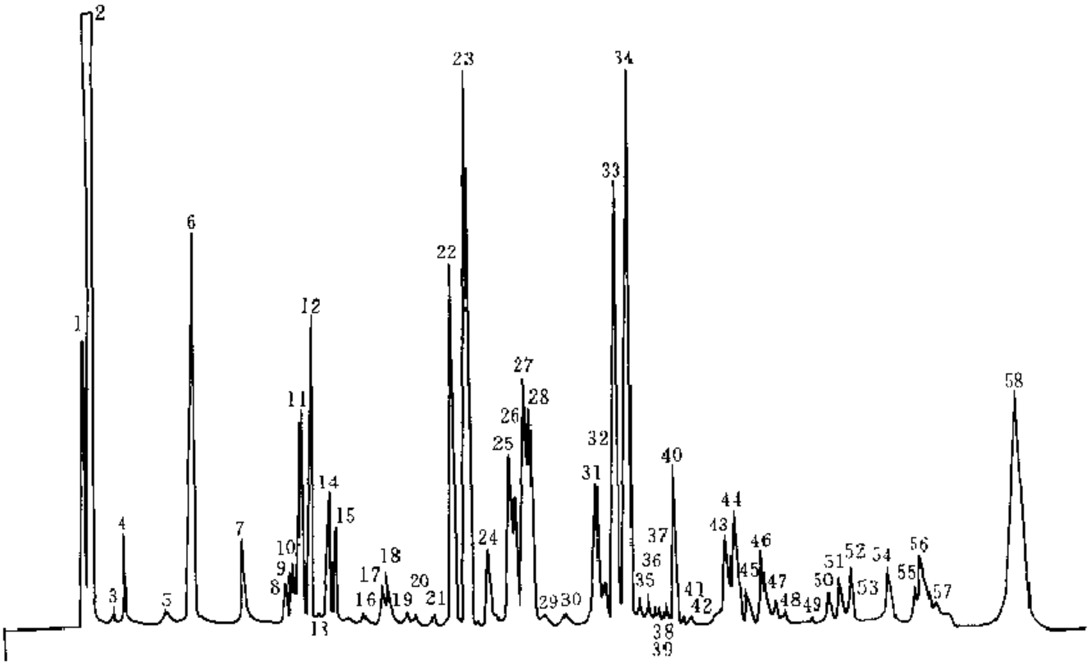


图 21-92　煤焦油轻馏分[18]

色谱峰：1—丁烯；2—二甲基醚；3—2，2-二甲基戊烷；4—苯；5—吡啶；6—甲苯；7—2-甲基吡啶+3,4-二甲基己烷；8—2,5-二甲基庚烷；9，18，48—未知物；10—吡咯；11—乙基苯；12—间二甲苯+对二甲苯；13—2-甲基辛烷；14—苯乙烯；15—邻二甲苯；16—异丙基苯+异丙基己烷；17—环辛烷+2,4-二甲基吡啶；19—3,5-二甲基辛烷；20—苯丙烯；21—正丙基苯；22—苯酚+3-乙基甲苯；23—1,3,5-三甲基苯；24—5-甲基壬烷+1-甲基-2-乙基苯；25—苯胺；26—苯并呋喃；27—顺-β-甲基苯乙烯；28—1,2,4-三甲基苯+叔丁基苯；29—异丁基苯；30—仲丁基苯；31—间异丙基甲苯；32—1,2,3-三甲基苯；33—邻甲酚+对甲基-异丙基苯；34—茚；35—间烯丙基甲苯；36—正丁基环己烷；37—1,3-二乙基苯；38—间正丙基甲苯；39—对正丙基甲苯；40—间甲酚+对甲酚+正丁基苯；41—邻二乙基苯；42—1-甲基-2-正丙基苯；43—1,4-二甲基-2-乙基苯；44—1,2-二甲基-4-乙基苯；45—叔戊基苯+1-甲基-3-叔丁基苯；46—4-乙基-乙烯基苯+1-甲基-4-叔丁基苯；47—2,5-二甲基苯乙烯；49—1,2,4,5-四甲基苯+1-乙基-4-异丙基苯；50—2,4-二甲基酚+1,3-二甲基-5-异丙基苯；51—2，5-二甲基酚+1-甲基-2-仲丁基苯；52—1,2,3,5-四甲基苯；53—异戊基苯；54—1,4-二甲基-2-异丙基苯；55—1-乙基-3-正丙基苯；56—1-甲基-2-异-烯丙基苯+4-甲基茚；57—1,3-二乙基-5-甲基苯；58—萘

色谱柱：HP-1，25m×0.2mm

柱　温：60℃

载　气：N_2，105kPa

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：260℃

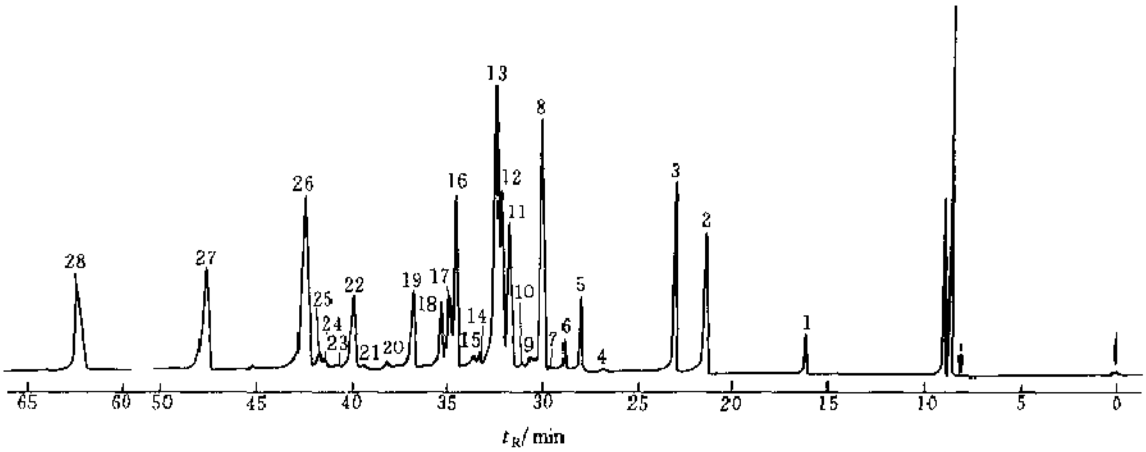


图 21-93 煤焦油二甲萘馏分[76]

色谱峰：1—萘；2—2-甲基萘；3—1-甲基萘；5—联苯；6—2-乙基萘；7—1-乙基萘；8—2,6-二甲基萘+2,7-二甲基萘；11—1,7-二甲基萘；12—1,3-二甲基萘；13—1,6-二甲基萘；16—2,3-二甲基萘；17—1,4-二甲基萘；18—1,5-二甲基萘；19—1,2-二甲基萘；26—苊；27—联苯撑氧；28—芴；4，9，10，14，15，20～25—未知物

色谱柱：DC-550，100m×0.25mm

柱　温：160℃

载　气：He

检测器：FID

气化室温度：300℃

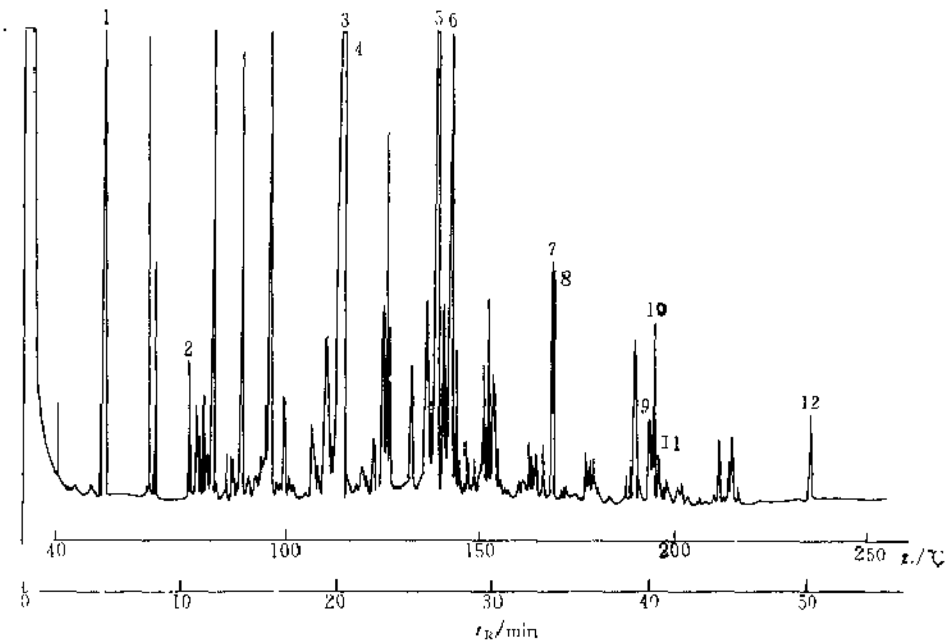


图 21-94 煤焦油[77]

色谱峰：1—萘；2—联苯；3—菲；4—蒽；5—荧蒽；6—芘；7—苯［a］蒽；8—䓛；9—苯并［e］芘；10—苯并［a］芘；11—苝；12—晕苯

色谱柱：SE-52，6m×0.30mm

柱　温：40℃（2min）→250℃，4℃·min^{-1}

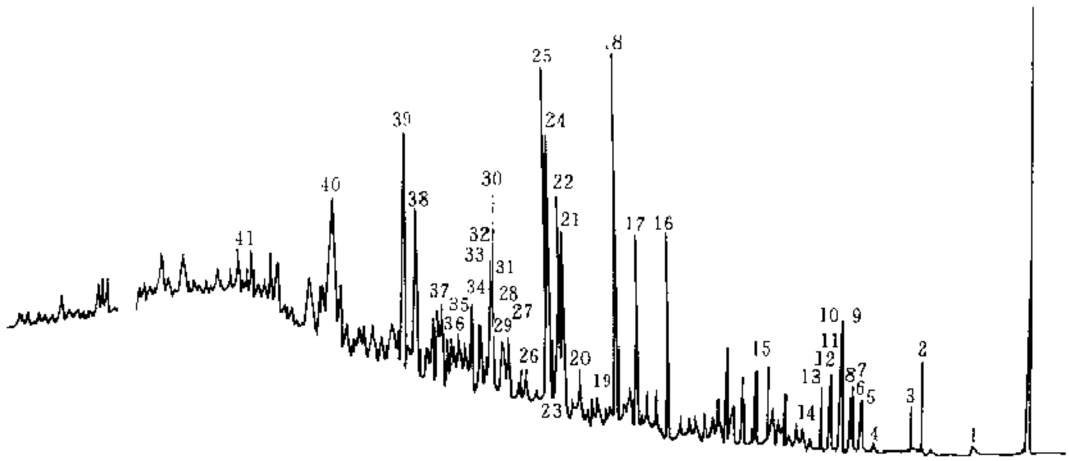


图 21-95　生油岩中芳烃[78]

色谱峰：1—萘；2—β-甲基萘；3—α-甲基萘；4—联苯；5—β-乙基萘；6—α-乙基萘；7—2,6-二甲基萘；8—2,7-二甲基萘；9—1,3-二甲基萘或1,7-二甲基萘；10—1,6-二甲基萘；11—1,4-二甲基萘+2,3-二甲基萘；12—1,5-二甲基萘；13—1,2-二甲基萘；14—1,8-二甲基萘；15—三甲基萘或C_3-萘；16—C_4-萘；17—二甲基二苯并呋喃；18—菲；19—蒽；20—三甲基二苯并呋喃；21—3-甲基菲；22—2-甲基菲；23—2-甲基蒽或4,5-亚甲基菲；24—9-甲基菲；25—1-甲基菲；26—3,6-二甲基菲+乙基菲；27，28，30，33—二甲基菲；29—2,7-二甲基菲；31—1,6-二甲基菲；32—1,7-二甲基菲；34—二甲基菲+荧蒽；35—1,8-二甲基菲；36—芘；37—1,2,3,4-四氢化苯並芘；38—三甲基菲或C_3-菲；39—1-甲基，7-异丙基菲；40—二甲基环戊并菲；41—三甲基环戊并菲

色谱柱：OV-101，25m×0.25mm　　检测器：FID

柱　温：120℃→290℃，5℃・min^{-1}　　气化室温度：290℃

载　气：N_2　　检测器温度：290℃

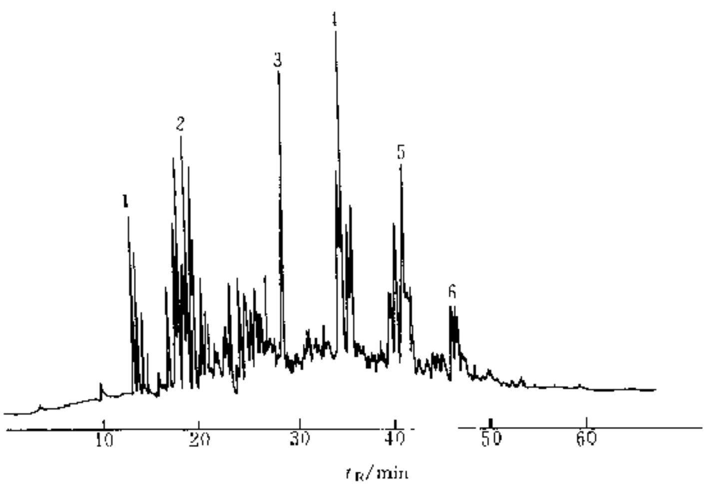


图 21-96　原油中芳烃[60]

色谱峰：1—二甲基萘；2—三甲基萘；3—菲；4—甲基菲；5—二甲基菲；6—三甲基菲

色谱柱：OV-101，25m×0.22mm　　检测器：FID

柱　温：130℃→320℃，2℃・min^{-1}　　气化室温度：350℃

载　气：N_2，0.36ml・min^{-1}　　检测器温度：350℃

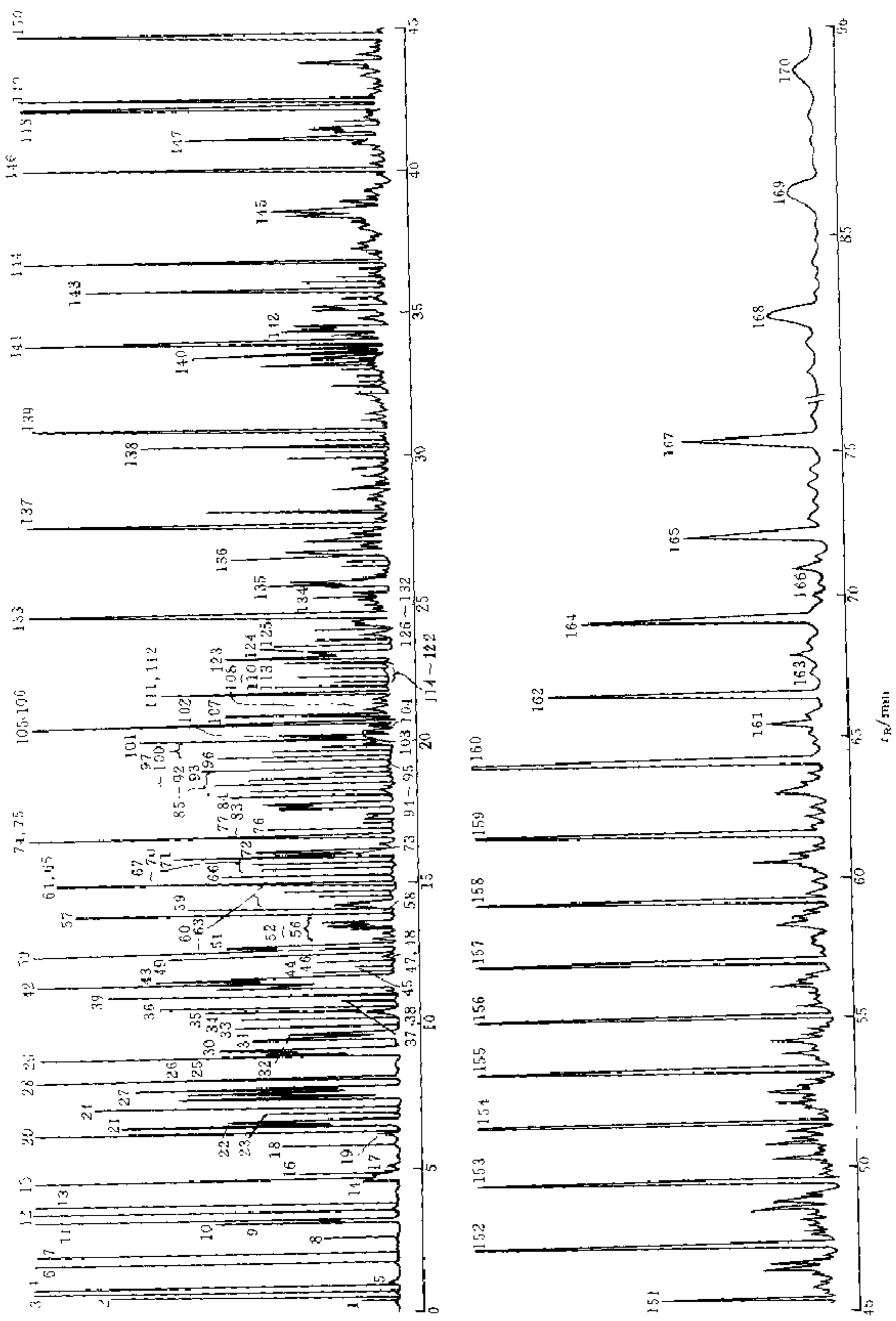


图 21-97 石油（二）[82]

色谱峰：1—乙烷；2—丙烷；3—异丁烷；4—正丁烷；5—2，2-二甲基丙烷；6—异戊烷；7—正戊烷；8—2，2-二甲基丁烷；9—环戊烷；10—2，3-二甲基丁烷；11—2-甲基戊烷；12—3-甲基戊烷；13—正己烷；14—2，2-二甲基戊烷；15—甲基环戊烷；16—2，4-二甲基戊烷；17—2，2，3-三甲基丁烷；18—苯；19—3，3-二甲基戊烷；20—环己烷；21—2-甲基己烷；22—2，3-二甲基戊烷；23—1，1-二甲基环戊烷；24—3-甲基己烷；25—1，3-顺-三甲基环戊烷；26—1，3-反-二甲基环戊烷；27—1，2-反-二甲基环戊烷；28—正庚烷；29—甲基环己烷；30—1，反-2，反-4-三甲基环戊烷；31—乙基环戊烷；32—2，4-二甲基己烷；33—1，反-2，顺-4-三甲基环戊烷；34—1，反-2，顺-3-三甲基环戊烷；35—2，3，4-三甲基戊烷；36—甲苯；37—2，3-二甲基己烷；38—1，1，2-三甲基环戊烷；39—2-甲基庚烷；40—4-甲基庚烷；41—3-甲基庚烷；42—3-乙基己烷；43—1，反-4-二甲基环己烷；44—1，1-二甲基环己烷；45—2，2，5-三甲基己烷；46—1-甲基，反-3-乙基环戊烷；47—1-甲基，反-2-乙基环戊烷；48—2，2，4-三甲基己烷；49—1，反-2-二甲基环己烷；50—正辛烷；51—1，反-3-二甲基环己烷；52—异丙基环戊烷；53—2，3，5-三甲基己烷；54—2，2-二甲基庚烷；55—2，4-二甲基庚烷；56—1，顺-2-二甲基环己烷；57—乙基环己烷；58—正丙基环戊烷；59—1，1，3-三甲基环己烷；60—1，1，4-三甲基环己烷；61—2，3，3-三甲基己烷；62—乙苯；63—2，3，4-三甲基己烷；64—1，3-二甲苯；65—3，4-二甲基庚烷；66—2-甲基辛烷；67—3-甲基辛烷；68—1，反-2，顺-3-三甲基环己烷；69—1，顺-3，顺-4-三甲基环己烷；70—1，顺-2，反-4-三甲基环己烷；71—1-甲基，顺-3-乙基环己烷；72—1-甲基，反-4-乙基环己烷；73，85—九碳环烷；74—正壬烷；75—1-甲基，反-2-乙基环己烷；76—1-甲基，反-3-乙基环己烷；77—1-甲基，顺-4-乙基环己烷；78—异丙苯；79—3，3，5-三甲基庚烷；80—九碳双环烷＋十碳链烷；81—异丙基环己烷；82，87，89，99，100，102，104，113—十碳环烷；83—1-甲基，顺-2-乙基环己烷；84—正丙基环己烷；86，97—十碳链烷；88—正丙苯；90—九碳双环烷；91—1-甲基，3-乙基苯；92—1-甲基，4-乙基苯；93—1，3，5-三甲苯；94—5-甲基壬烷；95—4-甲基壬烷；96—2-甲基壬烷；98—3-甲基壬烷；101—1，2，4-三甲苯；103—十碳环烷＋十一碳环烷；105—正癸烷；106—十碳环烷＋十一碳链烷；107—1-甲基，3-异丙基苯；108—1-甲苯，4-异丙基苯；109—十一碳环烷反链烷；110，111，120，124，127—十一碳链烷；112—1-甲基，乙异丙基苯；114—1，3-二乙基苯；115—1-甲苯，3-正丙基苯；116—1-甲基，4-正丙基苯；117—1，4-二乙基苯；118—正丁基苯；119—1，2-二乙基苯；121—5-甲基癸烷；122—4-甲基癸烷；123—2-甲基癸烷；125—3-甲基癸烷；126，128～132—十一碳环烷；133—正十一烷；134—C_4苯；135—2-甲基十氢化萘；136—萘；137—正十二烷；138—1-甲基萘；139—正十三烷；140—2-甲基萘；141—正十四烷；142，143，147—萘系化合物；144—正十五烷；145—3-甲基萘；146—正十六烷；148—正十七烷；149—姥鲛烷；150—正十八烷；151—植烷；152—正十九烷；153—正二十烷；154—正二十一烷；155—正二十二烷；156—正二十三烷；157—正二十四烷；158—正二十五烷；159—正二十六烷；160—正二十七烷；161—C_{28}甾烷；162—正二十八烷；163—C_{29}萜烷；164—正二十九烷；165—正三十烷；166—C_{30}萜烷；167—正三十一烷；168—正三十二烷；169—正三十三烷；170—正三十四烷

色谱柱：OV-101，50m×0.23mm

柱　温：30℃（2min）→300℃（40min），5℃·min^{-1}

载　气：He，0.8ml·min^{-1}；分流比－60：1

检测器：FID

气化室温度：320℃

检测器温度：330℃

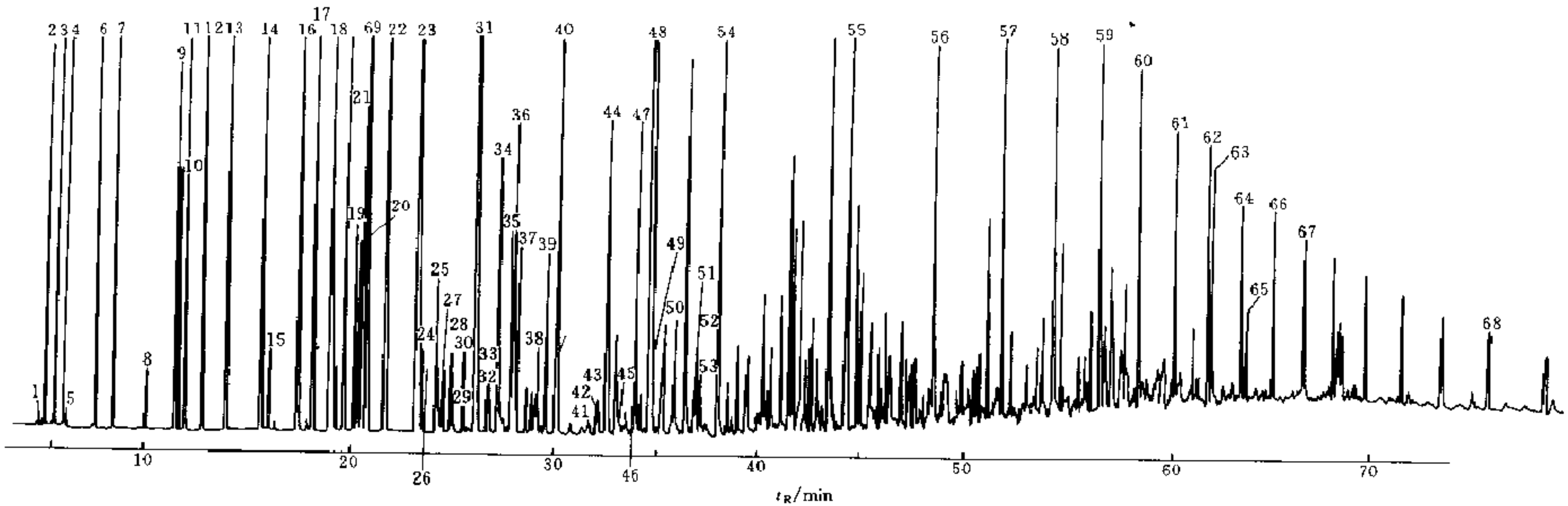


图 21-98 石油（二）[80]

色谱峰：1—乙烷；2—丙烷；3—异丁烷；4—正丁烷；5—2,2-二甲基丙烷；6—异戊烷；7—正戊烷；8—2,2-二甲基丁烷；9—环戊烷；10—2,3-二甲基丁烷；11—2-甲基戊烷；12—3-甲基戊烷；13—正己烷；14—甲基环戊烷；15—2,4-二甲基戊烷；16—苯；17—环己烷；18—2-甲基己烷；19—1，顺-3-二甲基环戊烷；20—1，反-3-二甲基环戊烷；21—1，反-2-二甲基环戊烷；22—正庚烷；23—甲基环己烷；24—1,1,3-三甲基环戊烷；25—乙基环戊烷；26—2,2,3-三甲基环戊烷；27—2,5-二甲基己烷；28—2,4-二甲基己烷；29—3,3-二甲基己烷；30—1，反-2，顺-3-三甲基环戊烷；31—甲苯；32—1,1,2-三甲基环戊烷；33—2,3-二甲基己烷；34—2-甲基庚烷；35—3-甲基庚烷；36—1，顺-3-二甲基环己烷；37—1，反-4-二甲基环己烷；38—二甲基环己烷；39—1，反-2-二甲基环己烷；40—正辛烷；41—2,2-二甲基庚烷；42—2,4-二甲基庚烷；43—1，顺-2-二甲基环己烷；44—乙基环己烷+1,1,3-三甲基环己烷；45—3,5-二甲基庚烷；46—2,5-二甲基庚烷；47—乙基苯；48—间二甲苯+对二甲苯；49—4-甲基辛烷；50—2-甲基辛烷；51—3-甲基辛烷；52—1-甲基，3-乙基环己烷；53—1-甲基，4-乙基环己烷；54—正壬烷；55—正癸烷；56—正十一烷；57—正十二烷；58—正十三烷；59—正十四烷；60—正十五烷；61—正十六烷；62—正十七烷；63—姥鲛烷；64—正十八烷；65—植烷；66—正十九烷；67—正二十烷；68—正二十五烷；69—内标物

色谱柱：CP Sil 5 CB，50m

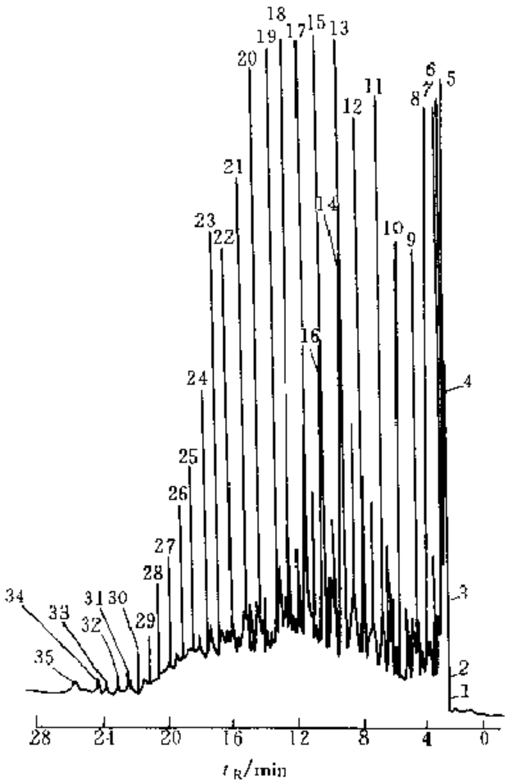
柱　温：10°C（2min）→115°C，3°C·min⁻¹→300°C（60min），10°C·min⁻¹

载　气：He，$\bar{u}$—cm·s⁻¹

检测器：FID

气化室温度：300°C

检测器温度：350°C



色谱峰：

1—n-$C_5$❶；2—n-C_6；3—n-C_7；4—n-C_8；5—n-C_9；6—n-C_{10}；7—n-C_{11}；8—n-C_{12}；9—n-C_{13}；10—n-C_{14}；11—n-C_{15}；12—n-C_{16}；13—n-C_{17}；14—姥鲛烷；15—n-C_{18}；16—植烷；17—n-C_{19}；18—n-C_{20}；19—n-C_{21}；20—n-C_{22}；21—n-C_{23}；22—n-C_{24}；23—n-C_{25}；24—n-C_{26}；25—n-C_{27}；26—n-C_{28}；27—n-C_{29}；28—n-C_{30}；29—n-C_{31}；30—n-C_{32}；31—n-C_{33}；32—n-C_{34}；33—n-C_{35}；34—n-C_{36}；35—n-C_{38}

❶正构烷烃，下角标“5”表示碳数。

色谱柱：SE-54，24m×0.24mm

柱　温：110℃→340℃，9℃·min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FID

气化室温度：350℃

检测器温度：350℃

图 21-99　石油（三）[85]

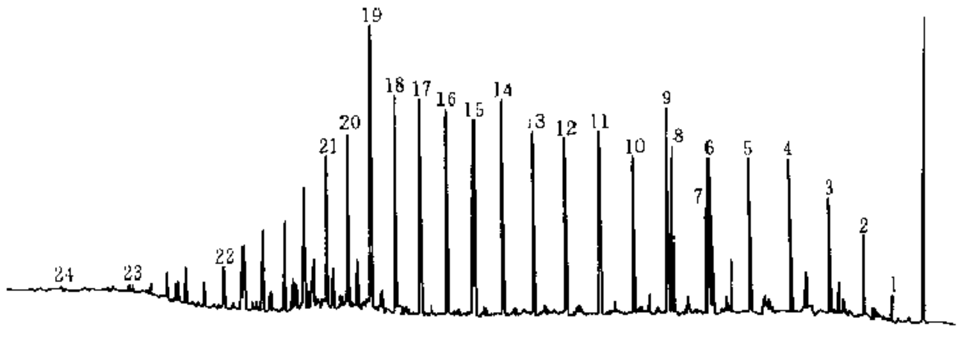


图 21-100　石油（四）[88]

色谱峰：1—正十二烷；2—正十三烷；3—正十四烷；4—正十五烷；5—正十六烷；6—正十七烷；7—姥鲛烷；8—正十八烷；9—植烷；10—正十九烷；11—正二十烷；12—正二十一烷；13—正二十二烷；14—正二十三烷；15—正二十四烷；16—正二十五烷；17—正二十六烷；18—正二十七烷；19—正二十八烷；20—正二十九烷；21—正三十烷；22—正三十五烷；23—正四十烷；24—正四十三烷

色谱柱：SE-54，20m×0.26mm

柱　温：120℃→350℃，4℃·min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FID

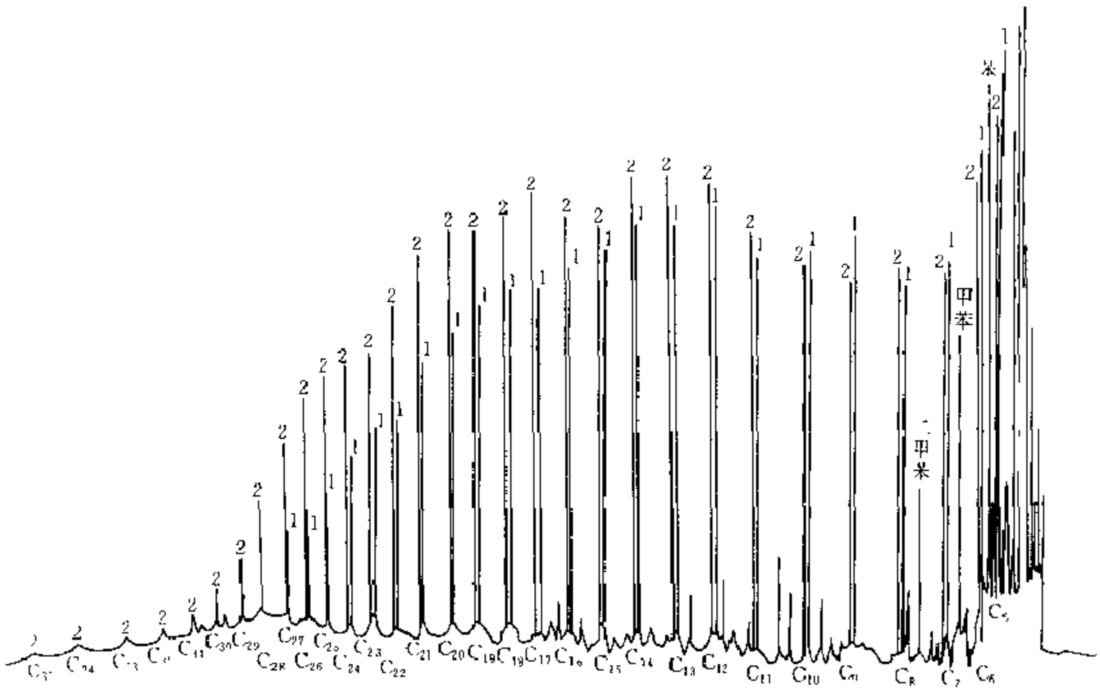


图 21-101 生油岩中烃(一)[83]

色谱峰：色谱图中 C_5～C_{35}表示碳数为 5～35 的烃，其中 1 为正构烯烃，2 为正构烷烃

色谱柱：SE 30，35m

气化室温度：340℃

柱 温：50℃→300℃，4℃·min^{-1}

检测器温度：350℃

载 气：H_2，30ml·min^{-1}

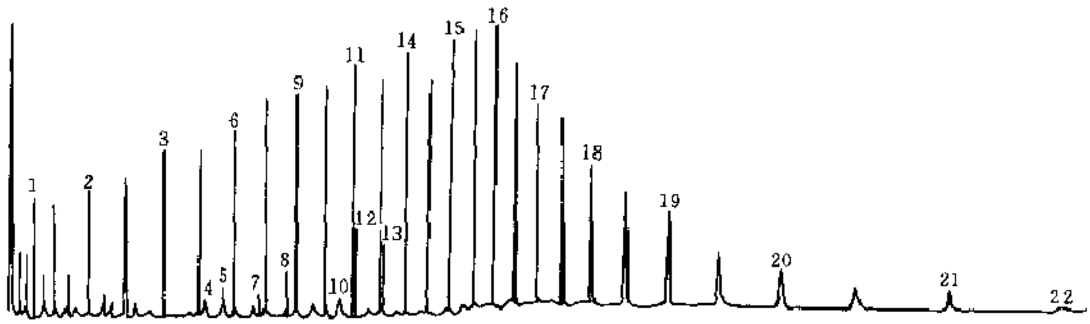


图 21-102 生油岩中烃(二)[84]

色谱峰：1—正庚烷；2—正壬烷；3—正十一烷；4—异十二烷；5—异十四烷；6—正十三烷；7—法呢烷；8—异十六烷；9—正十五烷；10—降姥鲛烷；11—正十七烷；12—姥鲛烷；13—植烷；14—正十九烷；15—正二十一烷；16—正二十三烷；17—正二十五烷；18—正二十七烷；19—正二十九烷；20—正三十一烷；21—正三十三烷；22—正三十四烷

色谱柱：OV 101，16m×0.2mm

柱 温：50℃→290℃，6℃·min^{-1}

载 气：N_2

检测器：FID

气化室温度：290℃

检测器温度：320℃

色谱峰：1—n-C_7；2—n-C_9；3—n-C_{12}；4—n-C_{17}；5—n-C_{24}；6—n-C_{29}；7—n-C_{35}；8—n-C_{35}；9—n-C_{40}

色谱柱：18烷基化学键合空心柱，27m×0.19mm

柱　温：103℃（2min）→300℃，15℃·min⁻¹

载　气：N_2

检测器：FID

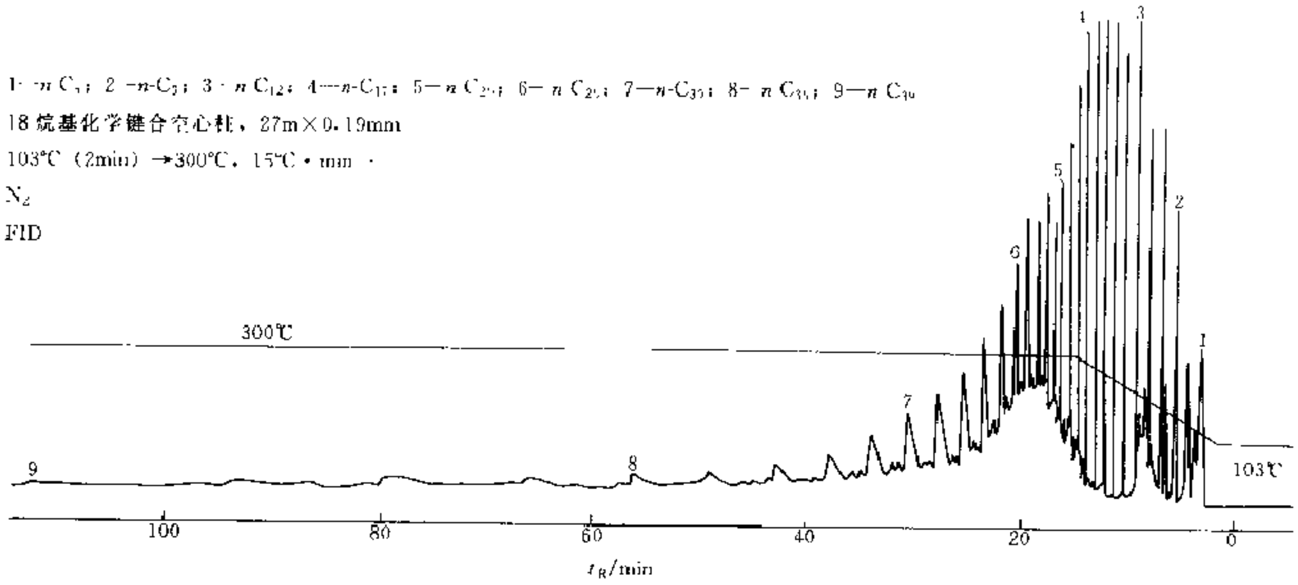


图 21-103　生油岩中烃(三)[66]

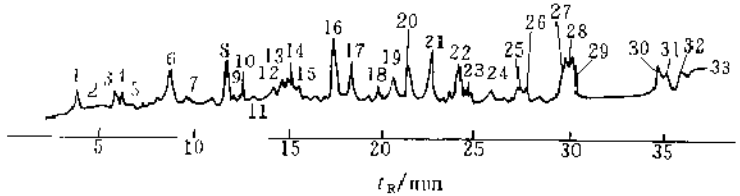


图 21-104　生油岩中双萜烷[73]

色谱峰：1—十六碳三环双萜烷；2，3，4，5—十七碳三环双萜烷；6，7—十八碳三环双萜烷；8，9—十九碳三环双萜烷；10，11，12，13，14—二十碳三环双萜烷；15—二十碳四环双萜烷；16，17—二十一碳三环双萜烷；18，20—二十二碳三环双萜烷；19，21—二十三碳四环双萜烷；21—二十二碳三环双萜烷；22，26—二十四碳三环双萜烷；23，27—二十四碳四环双萜烷；25—二十五碳三环双萜烷；28—二十七碳三环双萜烷；29，30，31—二十八碳三环双萜烷；32，33—二十九碳三环双萜烷

色谱柱：Dexsil 400空心柱

柱　温：130℃→280℃，1℃·min⁻¹

载　气：He，1ml·min⁻¹

检测器：MS

气化室温度：310℃

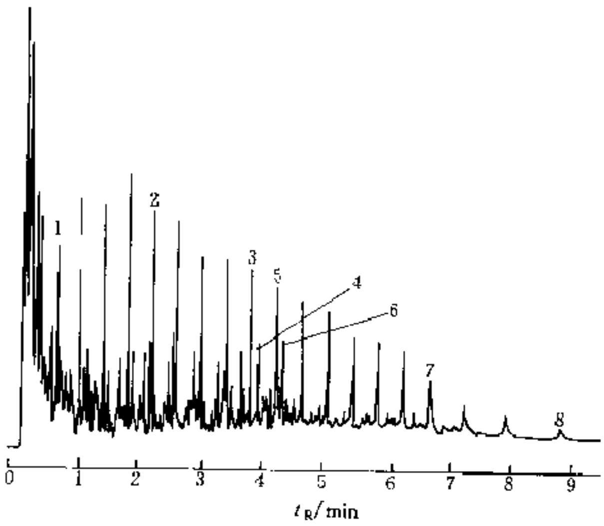


图 21-105　伊朗原油 (C_9～C_{27})[81]

色谱峰：1—正壬烷；2—正十三烷；3—正十七烷；4—姥鲛烷；5—正十八烷；6—植烷；7—正二十四烷；8—正二十七烷

色谱柱：石墨化炭黑 Vulcan+FFAP，4.5m×0.05mm

柱　温：35℃→230℃，30℃·min^{-1}

载　气：He，$\bar{u}$=40cm·s^{-1}

检测器：FID

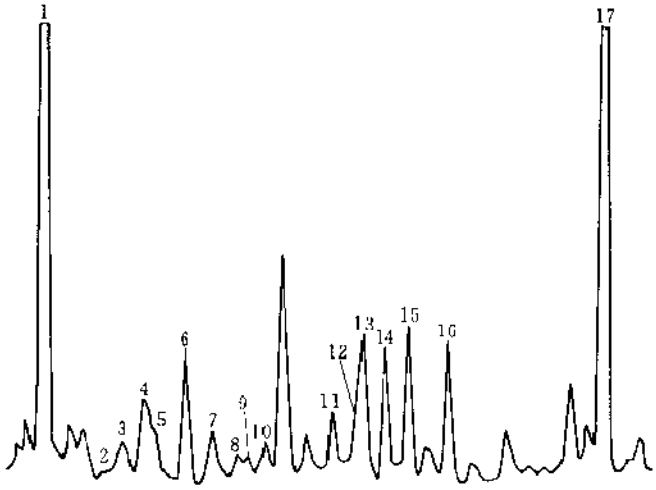


图 21-106　加拿大原油 (C_{11}～C_{12})[87]

色谱峰：1—正十一烷；2—4,6-二甲基癸烷；3—2,4-二甲基癸烷；4—2,5-二甲基癸烷；5—2,6-二甲基癸烷；6—2,7-二甲基癸烷；7—2,9-二甲基癸烷；8—3,7-二甲基癸烷；9—5,6-二甲基癸烷；10—2,8-二甲基癸烷；11—3,4-二甲基癸烷；12—6-甲基十一烷；13—5-甲基十一烷；14—4-甲基十一烷；15—2-甲基十一烷；16—3-甲基十一烷；17—正十二烷

色谱柱：甲基硅氧烷，50m×0.2mm，d_f=0.5μm

柱　温：40℃→300℃，5℃·min^{-1}

载　气：He，1ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：325℃

检测器温度：325℃

色谱峰：1—姥鲛烷；2—植烷；3—正廿烷；4—正三十烷；5—正四十烷；6—正五十烷；7—正六十烷；8—正六十七烷；9—正七十烷

色谱柱：甲基硅氧烷，15m×0.2mm，d_f—0.1μm

柱　温：60℃→400℃，15℃·min^{-1}

载　气：H_2　　　气化室温度：60℃→400℃

检测器：FID　　　检测器温度：420℃

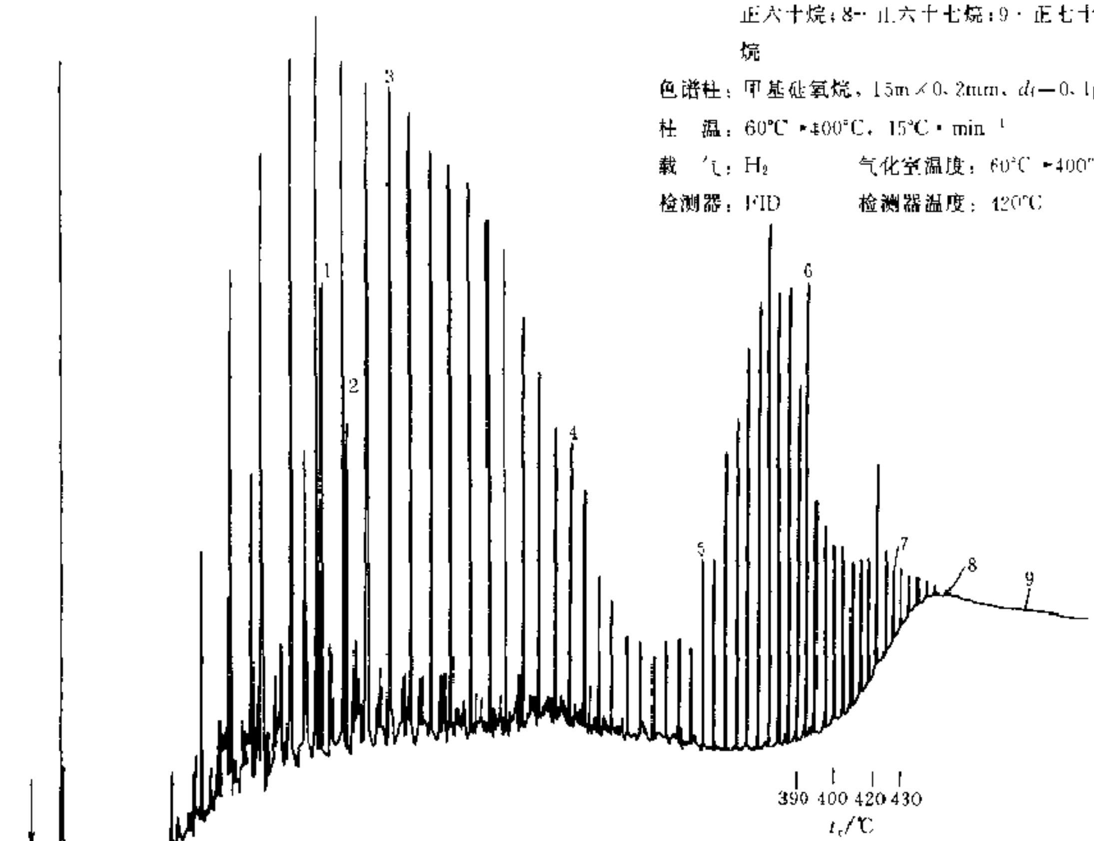


图 21-107　加拿大原油（C_{12}～C_{72}）[60]

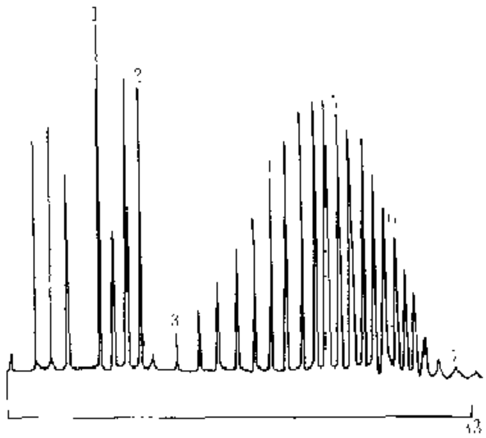


图 21-108　聚蜡（C_{14}～C_{80}）[61]

色谱峰：1—n-C[illegible]；2—n-C[illegible]；3—n-C[illegible]；4—n-C_{30}；5—n-C_{40}；6—n-C_{50}；7—n-C_{60}

色谱柱：2%Dexsil 300，Chromosorb G（80 目～100 目），1.5m×3mm

柱　温：50℃→390℃，8℃·min^{-1}

载　气：N_2，40ml·min

检测器：FID

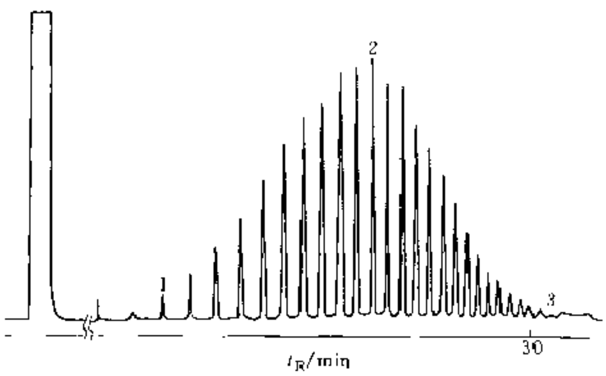


图 21-109　聚蜡 500（C_{20}～C_{70}）[62]

色谱峰：1—n-C_{20}；2—n-C[illegible]；3—n-C[illegible]

色谱柱：OV-1，6m×0.32mm，d_f—0.15μm

柱　温：30℃（1min）→390℃，10℃·min^{-1}

载　气：H_2，15ml·min^{-1}

检测器：FID

检测器温度：450℃

进样方式：柱上进样

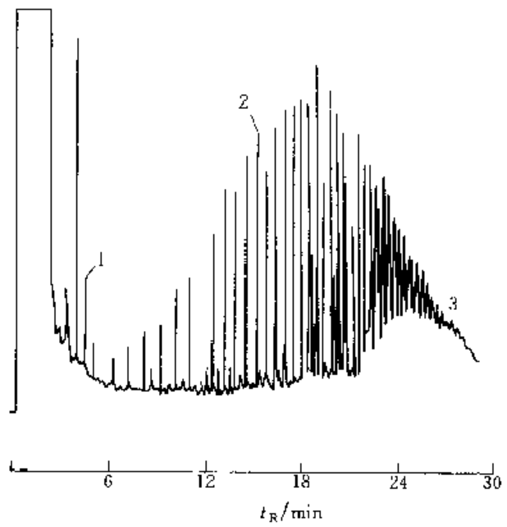


图 21-110　聚蜡 1000（C_{20}～C_{100}）[64]

色谱峰：1—n-C_{27}；2—n-C_{44}；3—n-C_{100}

色谱柱：甲基硅氧烷，8m×0.25mm，d_f=0.1μm

柱　温：50℃→430℃，15℃·min^{-1}

载　气：H_2

检测器：FID

气化室温度：50℃→440℃

检测器温度：450℃

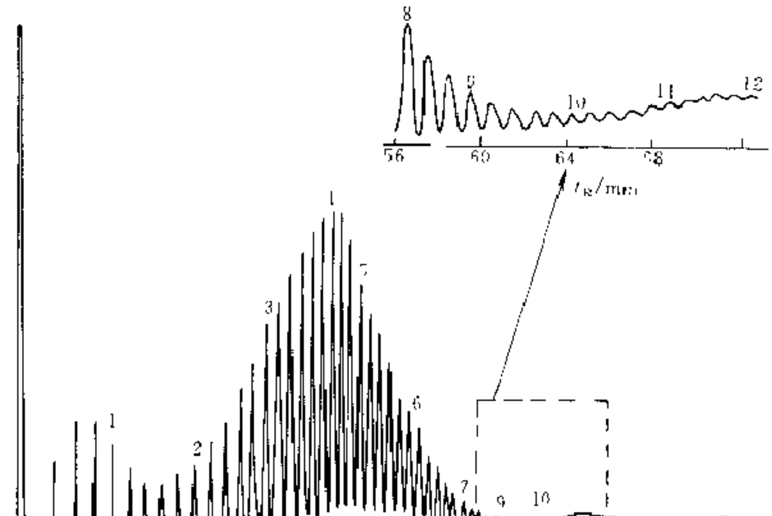


图 21-111　聚蜡 655（C_{20}～C_{120}）

色谱峰：1—n-C_{20}；2—n-C_{30}；3—n-C_{40}；4—n-C_{50}；5—n-C_{60}；6—n-C_{70}；7—n-C_{80}；8—n-C_{84}；9—n-C_{90}；10—n-C_{100}；11—n-C_{110}；12—n-C_{120}

色谱柱：非极性硅氧烷，7m（大孔径玻璃空心柱）

柱　温：40℃→430℃

载　气：H_2

检测器：FID

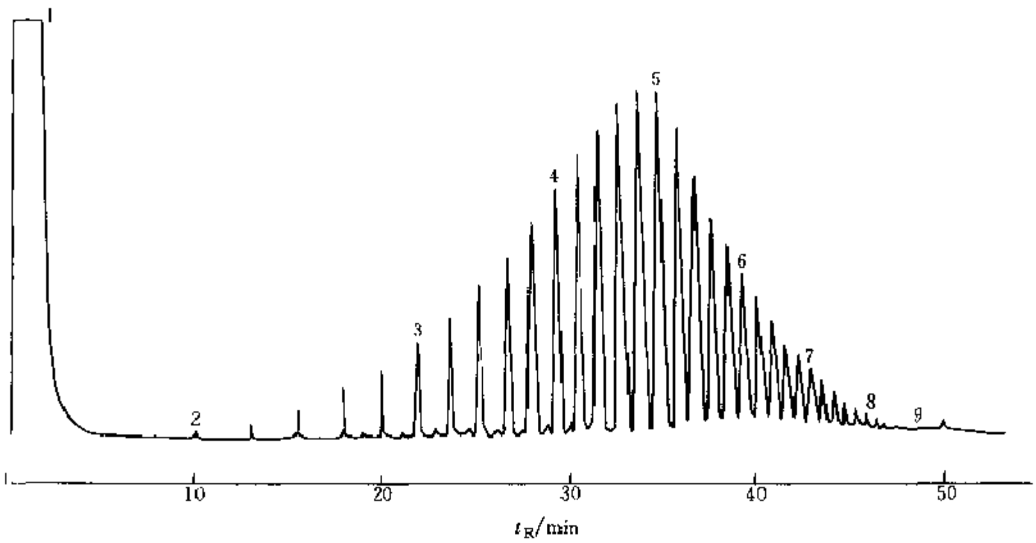


图 21-112 正构烷烃 (C_{20}～C_{90})[63]

色谱峰：1—甲苯；2—n-C_{20}；3—n-C_{30}；4—n-C_{40}；5—n-C_{50}；6—n-C_{60}；7—n-C_{70}；8—n-C_{80}；9—n-C_{90}

色谱柱：聚甲基硅氧烷，10m×0.3mm，d_f=0.15μm

柱 温：100℃→430℃，6℃·min^{-1}

载 气：He

参 考 文 献

1 上海石油化工总厂化工一厂. 分析化学，1975；3：446

2 GB/T3391-91

3 GB 3395—82. 中国国家标准汇编，1988；28：179

4 兰州化学工业公司石油化工厂. 烯烃生产分析. 北京：燃料化学工业出版社，1974：177

5 GB 7715—87. 中国国家标准汇编，1991；91：378

6 岛津. Gas Chromatograph Data Sheet，CA 180～918

7 GB/T 3392—91

8 李浩春，郑禄彬. 中国科学院大连化学物理研究所资料，1964

9 Alltech. Chromatography Catalog 350，1995；94

10 GB 7716—87. 中国国家标准汇编，1991；91：389

11 Corcia A D，Samperi R，Capponi G. Chromatographia，1997；10：554

12 GB 6017—85. 中国国家标准汇编，1990；66：354

13 GB 6024—85. 中国国家标准汇编，1990；66：386

14 GB 6013—85. 中国国家标准汇编，1990；66：335

15 J&W Scientific. 1994-1995 Chromatography Catalog & Reference Guide，1995：215

16 de Nijs R C M，de Zeeuw J. J Chromatogr，1983；279：41

17 GB 6600—86. 中国国家标准汇编，1990；74：153

18 顾惠祥，阎宝石，吴其灿等. 石油化工，1975；4(1)：33

19 Henich L H. J Chrom Sci，1988；26：198

20 Alltech. Chromatography Catalog 350，1995；135，28

21 何荔，董运宇. 第九次全国色谱学术报告会文集，1993；383

22 Al-Thamir W K. HRC&CC，1985；8：143

23 de Nijs R C M. Chrompack News，1983；10(4)：4

24 GB/T 13610—92
25 J&W Scientific. 1994-1995 Chromatography Catalog & Reference Guide, 1995: 217
26 Tuan H P, Janssen H G, Kuiper van Loo E M, et al. HRC, 1995; 18: 525
27 GB 10410. 3—89. 中国国家标准汇编, 1992; 129: 195
28 Snel R. Chromatographia, 1986: 21: 265
29 de Nijs R C M. Chrompack News, 1983; 10(3): 9
30 Chrompack News, 1986: 13(2): 3
31 Vatsala S, Singh A P, Kalsi W R, et al. Chromatographia, 1995; 40: 607
32 葛运宇, 顾文华, 李菊白等. 第四次全国色谱报告会文集, 1983: 178
33 高兰云, 马玉源, 罗玉忠等. 第二次全国石油化工色谱学术报告会文集, 1986: 186
34 黄撷云, 陈茂齐, 杨世琰. 色谱, 1996; 14: 291
35 康玉, 王宏志, 华平生. 第二次全国石油化工色谱学术报告会文集, 1986: 69
36 Bergmann W, Heller W, Hernanto A R, et al. Chromatographia, 1984; 19: 165
37 Chrompack. Chrompack General Catalog, 1994: 114
38 北京向阳化工厂试验室. 分析规程, 1973
39 GB 3144—82. 中国国家标准汇编, 1987; 24: 501
40 GB 8038—87. 中国国家标准汇编, 1991; 94: 669
41 GB 8229—87. 中国国家标准汇编, 1991; 97: 145
42 Schulze J, Hartung A, Kiess H, et al. Chromatographia, 1987; 19: 391
43 兰州合成橡胶厂. 石油化工技术, 1972; (2): 12
44 GB/T 12688.1—90. 中国国家标准汇编, 1993; 158: 597
45 杨玉国. 色谱, 1994; 12: 375
46 Boneva S, Balbolov E. Chromatographis, 1993; 37: 277
47 Chrompack News, 1984; 11(3): 7
48 李浩春, 戴朝政, 徐方宝等. 科学通报, 1983; 28: 84
49 吴少雯, 止源鹤. 第一次全国石油化工色谱学术报告会文集, 1984: 189
50 岛津. Gas Chromatograph Data Sheet, CA180-926
51 J Chrom Sci, 1993; 31: 196
52 Heyes P C, Jr, Anderson S D. J Chrom Sci, 1988; 26: 250
53 祝秀英, 匡宇红, 李杨. 第十次全国色谱学术报告会文集, 1995: 88
54 Bruner F, Lattanzi L, Mangani F, et al. Chromatographia, 1994; 38: 98
55 Lattanzi L, Attaran Rezai M. Chromatographia, 1994; 38: 114
56 Diehl J W, Finkbeiner J W, Disanzo F P. Anal Chem, 1995; 67: 2015
57 Kumar B, Kuchhal R K, Kumar P, et al. J Chrom Sci, 1986; 24: 99
58 徐福正, 江桂斌, 赵静敏. 分析化学, 1995; 23: 1165
59 唐振海, 计锦屏. 第一次全国石油化工色谱学术报告会文集, 1984: 220
60 张淑琴, 杨坚强. 第二次全国石油化工色谱学术报告会文集, 1986: 373
61 Hewlett-Packard. J Chrom Sci, 1987; 25: 2
62 Luke L A, Ray J E. HRC&CC, 1985; 8: 193
63 邹乃忠, 王昌时, 陆婉珍. 全国第二届毛细管色谱报告会文集, 1988: 78
64 Hinshaw J V, Jr. J Chrom Sci, 1987; 25: 49
65 Al Thamir W K. J Chrom Sci, 1988; 26: 345
66 陈葵华, 丁廷静. 第一次全国石油化工色谱学术报告会文集, 1984: 426
67 de Zeeum J, de Nijs R C M, Henrich L T. J Chrom Sci, 1987; 25: 71
68 邹乃忠, 李景兰, 陆婉珍. 分析化学, 1981; 9: 204
69 Durand J P, Fafet A, Barrean A. HRC, 1989; 12: 230
70 Supelco. Chromatography Products 1994, 1994: 716~716

71 Wang Z，Fingas M，Landriault M，et al. Anal Chem，1995；67：3491

72 J Chrom Sci，1990；28：88

73 HG/T 2033－91

74 GB 6704－86．中国国家标准汇编．1990；75：380

75 Zhang M J，Li S D，Chen B J. Chromatographia，1992；33：138

76 Kabot F J，Ettre L S. Anal Chem 1964；36：250

77 Wright B W，Lee M L. HRC&CC，1980；3：352

78 程中第．分析测试通报．1985；4(4)：21

79 孔庆云，王宁珠．分析测试通报．1985；4(2)：31

80 Osjord E H，Ranningsen H P，Tan L. HRC&CC，1985；8：683

81 Attaran Rezaii M，Lattanzi L. Chromatographia，1994；38：235

82 张百珍，韩霞，刘秀兰．第九次全国色谱学术报告会文集，1993：389

83 李玉恒．第二次全国石油化工色谱学术报告会文集．1986：376

84 程中第，肖廷荣，葛修丽．分析测试通报，1983；第二期(试刊)：32

85 唐振海，贺雅珍．色谱，1986：2：218

86 卢佩章，李浩春．仪器仪表学报，1983：4：237

87 Kissin Y V，Feulmer G P，Payne W B. J Chrom Sci，1986；24：164

88 顾佩英，王肖时，陆婉珍．分析化学，1985；13：87

89 Lipsky S R，Duffy M L. HRC&CC，1986；9：376

（李浩春　李全洪）

第二十二章　含氧化合物色谱图

第一节　醇与酚的色谱图

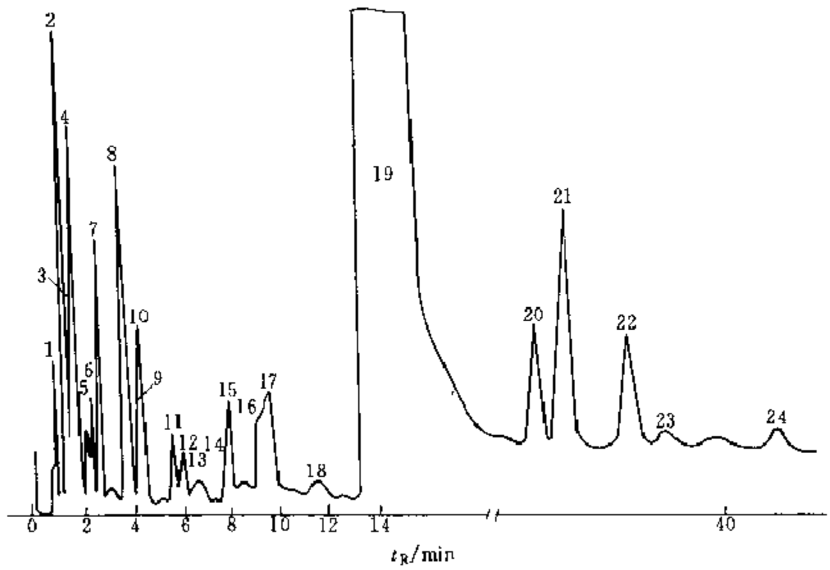


图 22-1　粗甲醇[2]

色谱峰：1—2-甲基丁烷；2—未知物；3—2-甲基戊烷；4—正己烷；5—2-甲基己烷；6—3-甲基己烷；7—正庚烷；8—甲酸甲酯；9—2,4-二甲基己烷；10—正辛烷；11—乙酸甲酯；12—丙酮；13—2-甲基辛烷；14—3-甲基辛烷；15—壬烷；16—苯；17—2-丁酮；18—3-甲基丁酮-2；19—甲醇；20—2-丁醇；21—1-丙醇；22—异丁醇；23—2-戊醇；24　正十二烷

色谱柱：10% Carbowax 300，Silicel C_{22}(80 目～100 目)，3m×4mm

柱　温：50℃

检测器：FID



图 22-2　工业甲醇[1]

色谱峰：1—异丙醇(内标)；2- 乙醇；3—甲醇

色谱柱：山梨醇：6201 酸洗担体(60 目～80 目)＝25：75(质量比)，5m×3mm

柱　温：100℃　　气化室温度：150℃

载　气：N_2　　检测器温度：150℃

检测器：FID

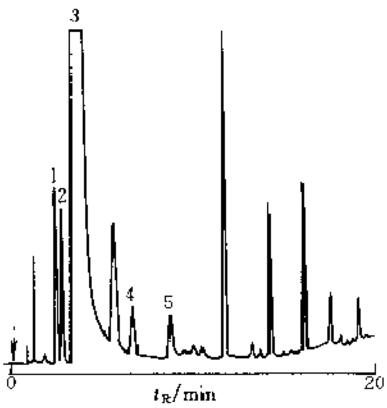


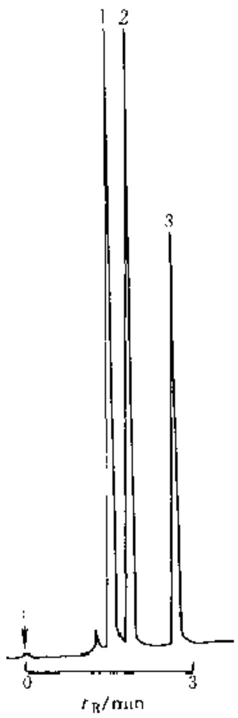
图 22-3　蒸馏酒精[3]

色谱峰：1—乙酸乙酯；2—甲醇；3—乙醇；4—正丙醇；5 异丁醇

色谱柱：CP-Wax 57 CB，10m×0.53mm，d_f＝2.0μm

柱　温：50℃(6min)→180℃，5℃·min^{-1}

载　气：H_2，5kPa　　检测器：FID



色谱峰：1—水；2—甲醇；3—乙醇

色谱柱：PoraPLOTQ，10m×0.32mm，d_f=10μm

柱　温：175℃

载　气：H_2，50kPa

检测器：TCD

图 22-4　醇与水[4]

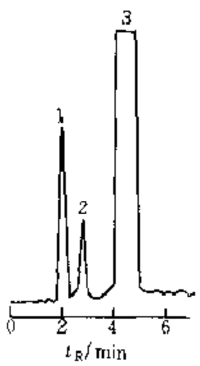


图 22-5　痕量甲醇与水[5]

色谱峰：1—水；2—甲醇；3—乙醇

色谱柱：Porapak N，2m×3mm

柱　温：170℃

载　气：Ar，40ml·min

检测器：微波诱导等离子体离子化检测器

气化室温度：180℃

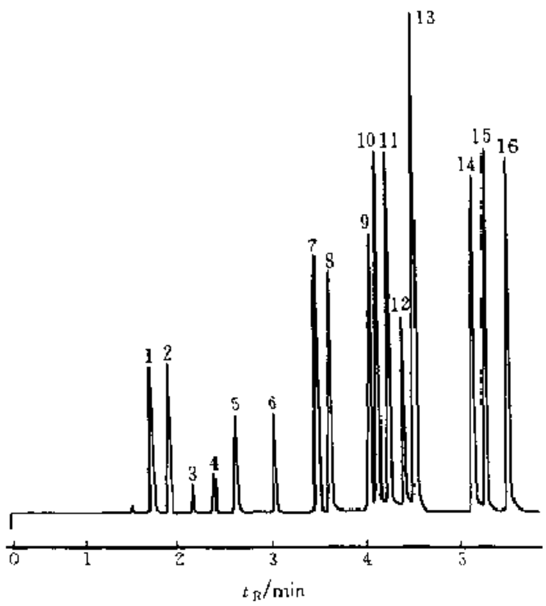


图 22-6　C_1～C_5醇（一）[6]

色谱峰：1—甲醇；2—乙醇；3—2-丙醇；4—2-甲基-2-丙醇；5—1-丙醇；6—2-丁醇；7—2-甲基-1-丙醇；8—2-甲基-2-丁醇；9—1-丁醇；10—3-甲基-2-丁醇；11—3-戊醇；12—2,2-二甲基-1-丙醇；13—2-戊醇；14—2-甲基-1-丁醇；15—3-甲基-1-丁醇；16—1-戊醇

色谱柱：石墨化炭黑 Vulcan+Carbowax1500，30m×0.25mm

柱　温：40℃（2min）→160℃，20℃·min^{-1}

载　气：He，$\bar{u}$=30cm·s^{-1}

检测器：FID

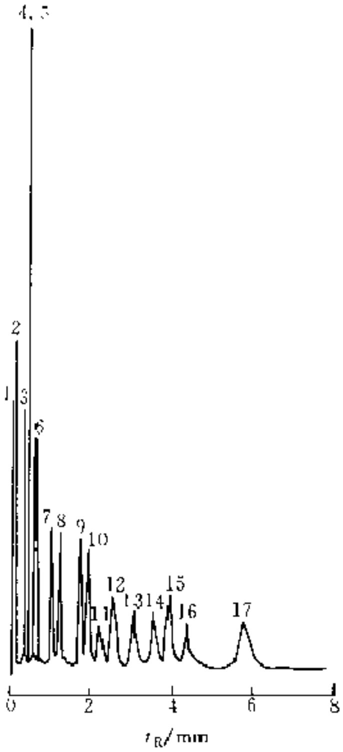


图 22-7 C_1～C_5 醇（一）[7]

色谱峰：1—甲醇；2—乙醇；3—2-丙醇；4—丙烯醇；5—1-丙醇；6—2-甲基-2-丙醇；7—2-丁醇；8—2-甲基-1-丙醇；9—1-丁醇；10—2-甲基-2-丁醇；11—2,2-二甲基-1-丙醇；12—3-甲基-2-丁醇；13—3-戊醇；14—2-戊醇；15—2-甲基-1-丁醇；16—3-甲基-1-丁醇；17—1-戊醇

色谱柱：0.2% Carbowax 1500，Carbopack C（80 目～100 目），1.7m×2mm

柱　温：125℃

载　气：N_2，20ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：200℃

检测器温度：250℃

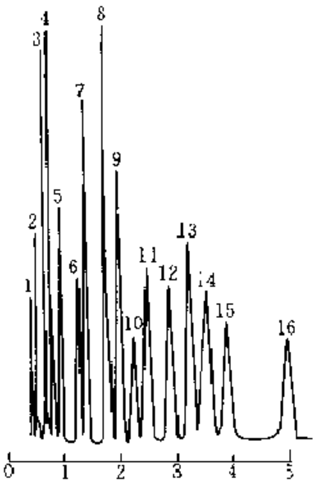


图 22-8 C_1～C_5 醇（二）[7]

色谱峰：1—甲醇；2—乙醇；3—1-丙醇；4—正丙醇；5—叔丁醇；6—1-丁醇；7—2-甲基-1-丙醇；8—正丁醇；9—2-甲基-2-丁醇；10—2,2-二甲基-1-丙醇；11—3-甲基-2-丁醇；12—3-戊醇；13—2-戊醇；14—2-甲基-1-丁醇；15—3-甲基-1-丁醇；16—正戊醇

色谱柱：Carbopack F-SL（80 目～100 目），2m×2mm

柱　温：130℃

载　气：N_2，15ml·min^{-1}

检测器：FID

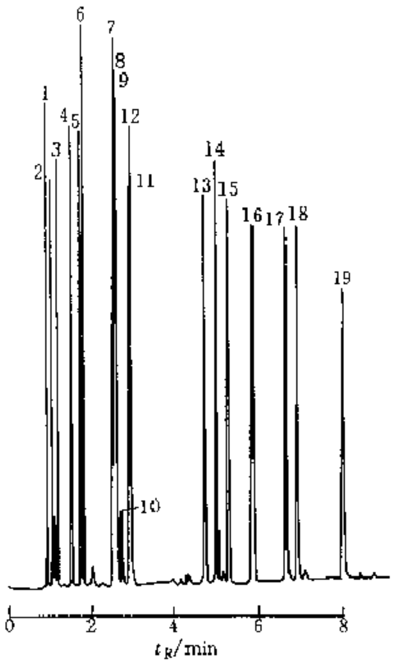


图 22-9 C_1～C_6 醇[9]

色谱峰：1—甲醇；2—乙醇；3—2-丙醇；4—正丙醇；5—仲-1-丁醇；6—2-甲基-3-丁烯-2-醇；7—2-甲基-2-丙烯-1-醇；8—正丁醇；9—D，L-3-甲基-2-丁-1-醇；10—2-丁烯-1-醇；11—D，L-2-戊-1-醇；12—3-戊醇；13—1-戊醇；14—3-己醇；15—2-己醇；16—2,4-二甲基-3-戊醇；17—2-甲基-1-戊醇；18—2-乙基-1-丁醇；19—1-己醇

色谱柱：BP-10，25m×0.22mm，d_f=0.25μm

柱　温：45℃（2min）→80℃，3℃·min

检测器：FID

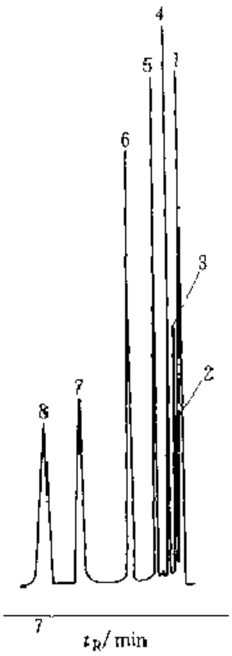


图 22-10　C_1～C_7 醇[10]
色谱峰：1—水；2—甲醇；3—乙醇；4—丙醇；5—丁醇；6—戊醇；7—己醇；8—庚醇
色谱柱：GDX-303，2m×3mm
柱　温：195℃
载　气：H_2，63.5ml·min^{-1}
检测器：TCD

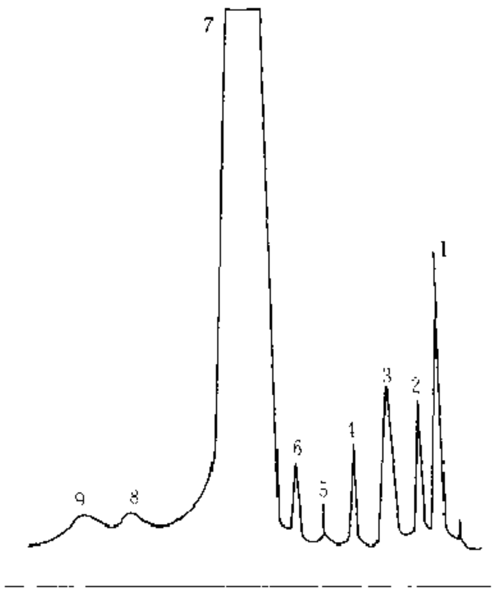


图 22-11　异丙醇[11]
色谱峰：1—己烷；2—异丙醚；3—正辛烷；4—丙酮；5—苯；6—叔丁醇；7—异丙醇；8—仲丁醇；9—正丙醇
色谱柱：PEG 400+6201 担体（60 目～80 目）质量比为 20∶80，3m×4mm
柱　温：65℃　　　　气化室温度：150℃
载　气：N_2　　　　检测器温度：140℃
检测器：FID

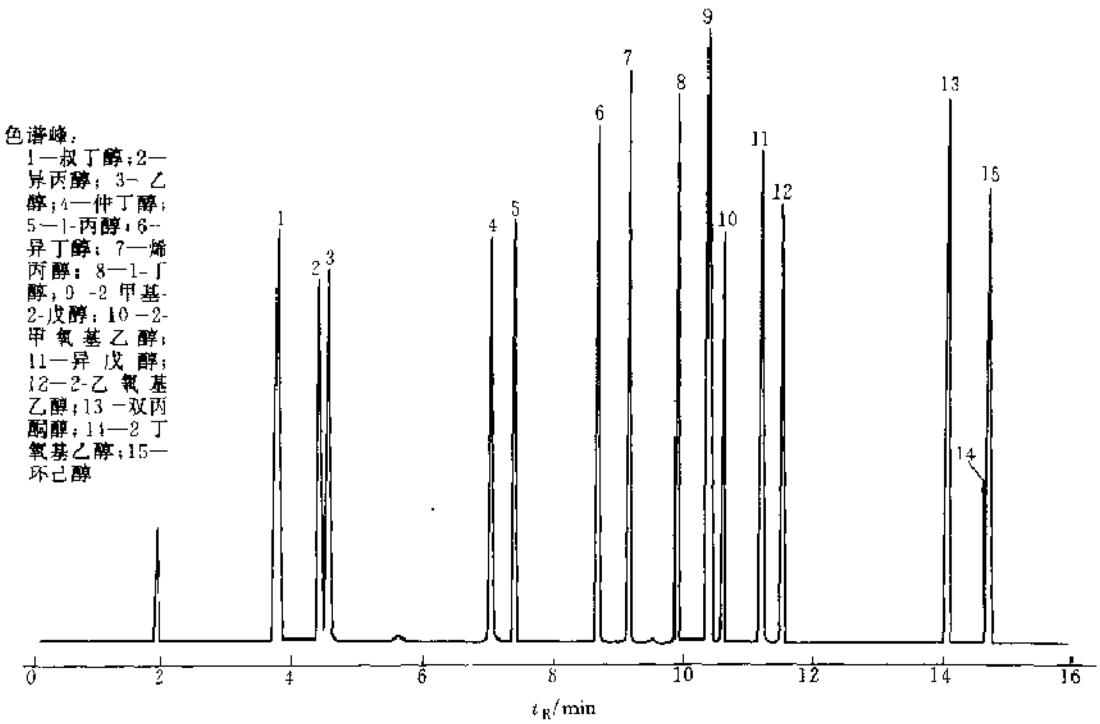


图 22-12　醇——NIOSH 方法 1400～1403[12]
色谱柱：DB Wax，30m×0.32mm，d_f=0.5μm　　检测器：FID
柱　温：40℃(5min)→150℃，10℃·min^{-1}　　气化室温度：250℃
载　气：He，$\bar{u}$=35cm·s^{-1}(40℃)　　检测器温度：300℃

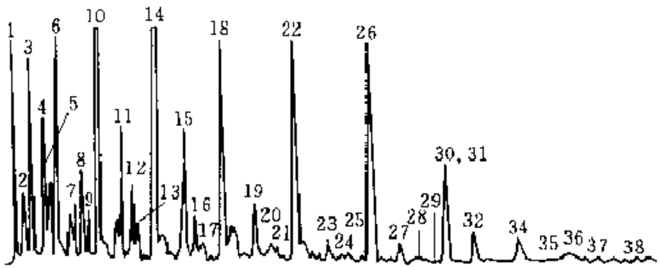


图 22-13 C_4～C_{14}脂肪醇[13]

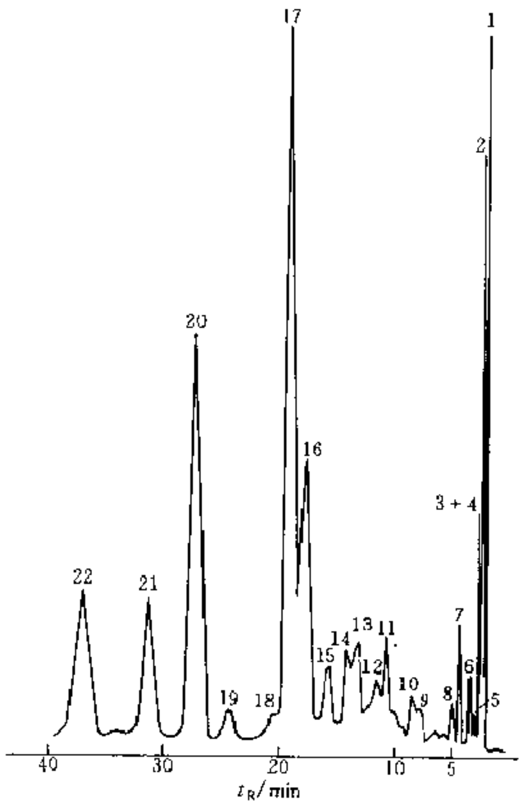
色谱峰：1—n-C_4 醇；2—n-C_7 烷；3—n-C_5 醇；4—n-C_8 烷；5—i^o-C_5 醇；6—n-C_6 醇；7—n-C_9 烷；8—i^o-C_7 醇；9—i^*-C_7 醇；10—n-C_7 醇；11—n-C_{10}烷；12—i^o-C_8 醇；13—i^*-C_8 醇；14—n-C_8 醇；15—n-C_{11}烷；16—i^o-C_9 醇；17—i^*-C_9 醇；18—n-C_9 醇；19—n-C_{12}烷；20—i^o-C_{10}醇；21—i^*-C_{10}醇；22—n-C_{10}醇；23—n-C_{13}烷；24—i^o-C_{11}醇；25—i^*-C_{11}醇；26—n-C_{11}醇；27—n-C_{14}烷；28—i^o-C_{12}醇；29—i^*-C_{12}醇；30—n-C_{12}醇；31—n-C_{15}烷；32—i^o-C_{13}醇；33—i^*-C_{13}醇；34—n-C_{13}醇；35—n-C_{16}烷；36—i^o-C_{14}醇；37—i^*-C_{14}醇；38—n-C_{14}醇

注：i^o 醇的结构为 R—C(OH)(CH_3)—C(CH_3)(CH_3)—CH_3；i^*—醇的结构为 R—C(OH)(C_2H_5)—C_3H_7

色谱柱：甲基乙烯基硅氧烷，40m×0.25mm　　检测器：FID

柱　温：100℃→200℃，5℃・min^{-1}　　气化室温度：280℃

载　气：H_2　　检测器温度：280℃



色谱峰：1～4—六碳烯；5～15—六碳烯二聚体；16—2,3-二甲基-2-丁醇；17—2-甲基-2-戊醇；18—3-甲基-3-戊醇；19—2-甲基-3-戊醇；20—4-甲基-2-戊醇；21—3-己醇；22—2-己醇

色谱柱：20% PEG 400，6201 担体(80 目～100 目)；2.80m×3mm

柱　温：100℃

载　气：N_2，33ml・min^{-1}

检测器：FID

图 22-14　六碳醇[14]

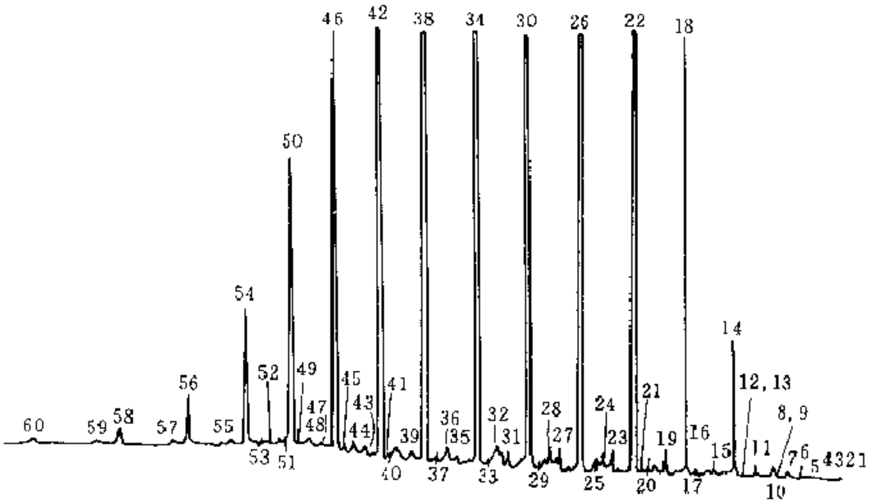


图 22-15 C_6～C_{21}脂肪醇[13]

色谱峰：1—n-C_4醇；2—n-C_7烷；3—n-C_5醇；4—n-C_8烷；5—i°-C_6醇；6—n-C_6醇；7—n-C_9烷；8—i°-C_7醇；9—i^{*}-C_7醇；10—n-C_7醇；11—n-C_{10}烷；12—i°-C_8醇；13—i^{*}-C_8醇；14—n-C_8醇；15—n-C_{11}烷；16—i°-C_9醇；17—i^{*}-C_9醇；18—n-C_9醇；19—n-C_{12}烷；20—i°-C_{10}醇；21—i^{*}-C_{10}醇；22—n-C_{10}醇；23—n-C_{13}烷；24—i°-C_{11}醇；25—i^{*}-C_{11}醇；26—n-C_{11}醇；27—n-C_{14}烷；28—i°-C_{12}醇；29—i^{*}-C_{12}醇；30—n-C_{12}醇；31—n-C_{15}烷；32—i°-C_{13}醇；33—i^{*}-C_{13}醇；34—n-C_{13}醇；35—n-C_{16}烷；36—i°-C_{14}醇；37—i^{*}-C_{14}醇；38—n-C_{14}醇；39—n-C_{17}烷；40—i°-C_{15}醇；41—i^{*}-C_{15}醇；42—n-C_{15}烷；43—n-C_{18}烷；44—i°-C_{16}醇；45—i^{*}-C_{16}醇；46—n-C_{16}醇；47—n-C_{19}烷；48—i°-C_{17}醇；49—i^{*}-C_{17}醇；50—n-C_{17}醇；51—n-C_{20}烷；52—i°-C_{18}醇；53—i^{*}-C_{18}醇；54—n-C_{18}醇；55—n-C_{21}烷；56—n-C_{19}醇；57—n-C_{22}烷；58—n-C_{20}醇；59—n-C_{23}烷；60—n-C_{21}醇

注：i°—醇的结构为 $R\text{—}C(OH)(CH_3)\text{—}C(CH_3)_2\text{—}CH_3$；$i^{*}$—醇的结构为 $R\text{—}C(OH)(C_2H_5)\text{—}C_3H_7$

色谱柱：甲基乙烯基硅氧烷，40m×0.25mm
柱　温：100℃→250℃，5℃·min⁻¹
载　气：H_2
检测器：FID
气化室温度：280℃
检测器温度：280℃

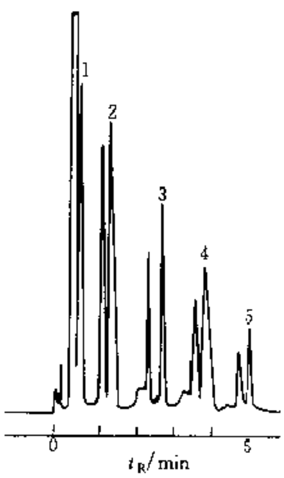


图 22-16 C_7～C_{15}脂肪醇[13]

色谱峰：1—正庚醇；2—正壬醇；3—正十一醇；4—正十三醇；5—正十五醇
色谱柱：3% OV-61，Chromosorb W AW-DMCS（80 目～100 目），0.5m×2.6mm
柱　温：80℃→180℃，20℃·min⁻¹
载　气：N_2，50ml·min⁻¹
检测器：FID
气化室温度：300℃
检测器温度：300℃

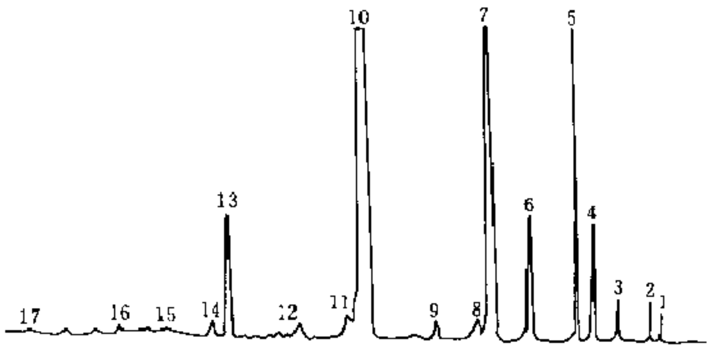


图 22-17 C_{11}～C_{24}脂肪醇[13]

色谱峰：1—i°-C_{11}醇；2—n-C_{15}烷；3—n-C_{16}烷；4—n-C_{14}醇；5—n-C_{17}烷；6—n-C_{18}烷；7—n-C_{16}醇；8—n-C_{19}烷；9—n-C_{20}烷；10—n-C_{18}醇；11—n-C_{21}烷；12—n-C_{22}烷；13—n-C_{20}醇；14—n-C_{23}烷；15—n-C_{24}烷；16—n-C_{22}醇；17—n-C_{24}醇

注：i°—醇的结构为 $R\text{—}C(OH)(CH_3)\text{—}C(CH_3)_2\text{—}CH_3$

色谱柱：甲基乙烯基硅氧烷，40m×0.25mm
柱　温：220℃
气化室温度：280℃
载　气：H_2
检测器温度：280℃
检测器：FID

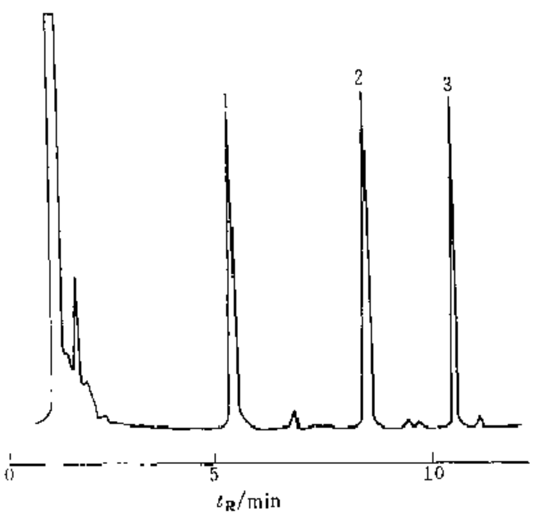


图 22-18 乙炔型醇[16]

色谱峰：1— $C_2H_5-C(CH_3)(OH)-C{\equiv}C-C(CH_3)(OH)-C_2H_5$；

2— $CH_3-CH(CH_3)-CH_2-C(CH_3)(OH)-C{\equiv}C-C(CH_3)(OH)-CH_2-CH(CH_3)-CH_3$；

3— $CH_3-CH(CH_3)-(CH_2)_2-C(CH_3)(OH)-C{\equiv}C-C(CH_3)(OH)-(CH_2)_2-CH(CH_3)-CH_3$

色谱柱：3% OV-101，Chromosorb W HP（80 目～100 目），1.83m×3mm

柱　温：85℃→200℃，10℃·min^{-1}　气化室温度：225℃

载　气：N_2，30ml·min^{-1}　检测器温度：225℃

检测器：FID

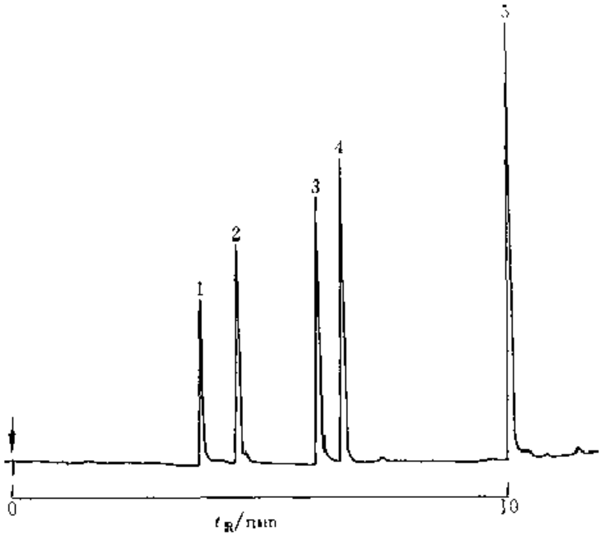


图 22-19 C_2～C_5 氨基醇[17]

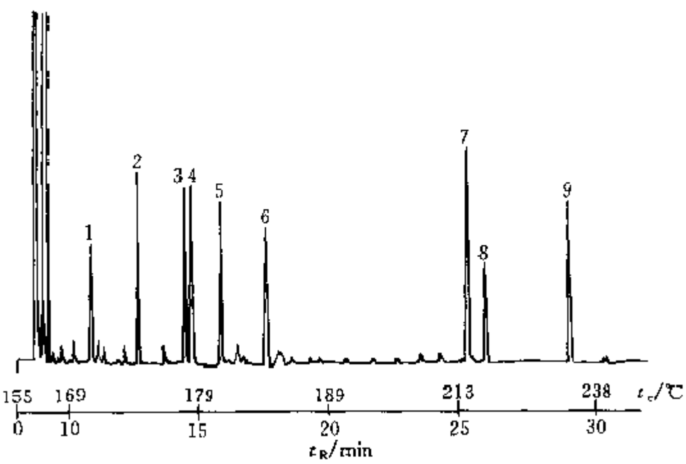
色谱峰：1—2-氨基乙醇；2—1-氨基丙醇；3—2-(乙基氨基)乙醇；4—2-氨基-1-丁醇；5—5-氨基-1-戊醇

色谱柱：CP-Sil 5CB，50m×0.53mm，d_f=5μm

柱　温：65℃→200℃，10℃·min^{-1}

载　气：H_2，50kPa

检测器：FID



色谱峰：

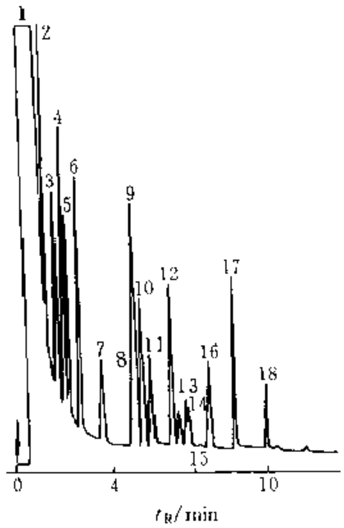
1—2-氨基丙醇；2—2-氨基丁醇；3—2-氨基异戊醇；4—2-氨基戊醇；5—2-氨基异己醇；6—2-氨基己醇；7—苯基甘氨醇；8—丝氨醇；9—苯基丙氨醇

图 22-20 氨基醇 （TBDMS 衍生物）[18]

色谱柱：SPB-1，30m×0.25mm，d_f=0.25μm　载　气：N_2

柱　温：153℃（2min）→190℃，2℃·min^{-1}→220℃，5℃·min^{-1}→290℃（20min），10℃·min^{-1}　检测器：FID

气化室温度：260℃



色谱峰：1—异丙醇；2—甲基乙二醇；3—单乙二醇；4—乙基乙二醇；5—单-1，2-丙二醇；6—异丙基乙二醇；7—乙酸甲基乙二醇酯；8—乙酸乙基乙二醇酯；9—丁基乙二醇；10—甲基二乙二醇；11—二乙二醇；12—乙基二乙二醇；13—1-二丙二醇；14—2-二丙二醇；15—3-二丙二醇；16—乙酸丁基乙二醇酯；17—丁基二乙二醇；18—乙酸丁基二乙二醇酯

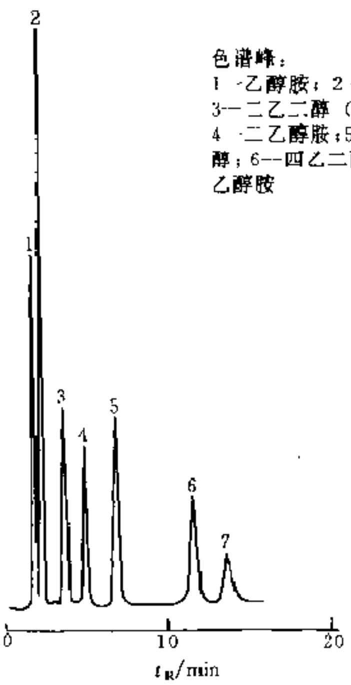
色谱柱：CP-Sil 5 CB，10m×0.53mm，d_f=5.0μm

柱　温：50℃→250℃，10℃·min^{-1}

载　气：N_2，10ml·min^{-1}

检测器：FID

图 22-21　异丙醇中乙二醇[19]



色谱峰：

1—乙醇胺；2—乙二醇；3—二乙二醇（内标物）；4—二乙醇胺；5—三乙二醇；6—四乙二醇；7—三乙醇胺

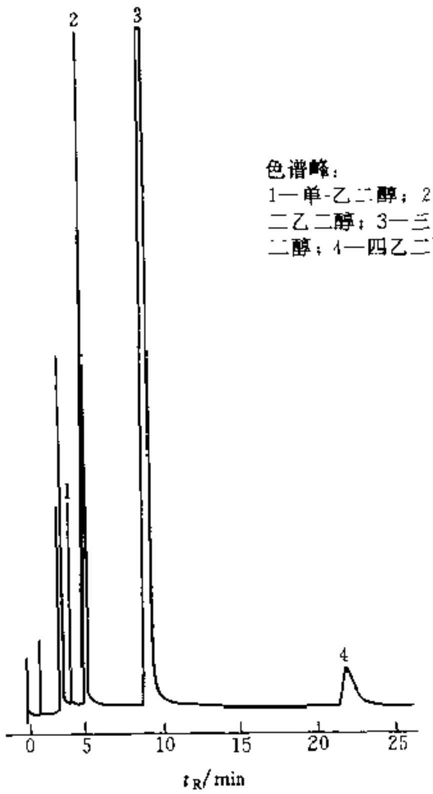
图 22-22　乙二醇(一)[20]

色谱柱：Carbowax 20M，25m×0.53mm，d_f=1μm

柱　温：180℃→230℃，5℃·min^{-1}

载　气：N_2　　气化室温度：310℃

检测器：FID　　检测器温度：300℃



色谱峰：

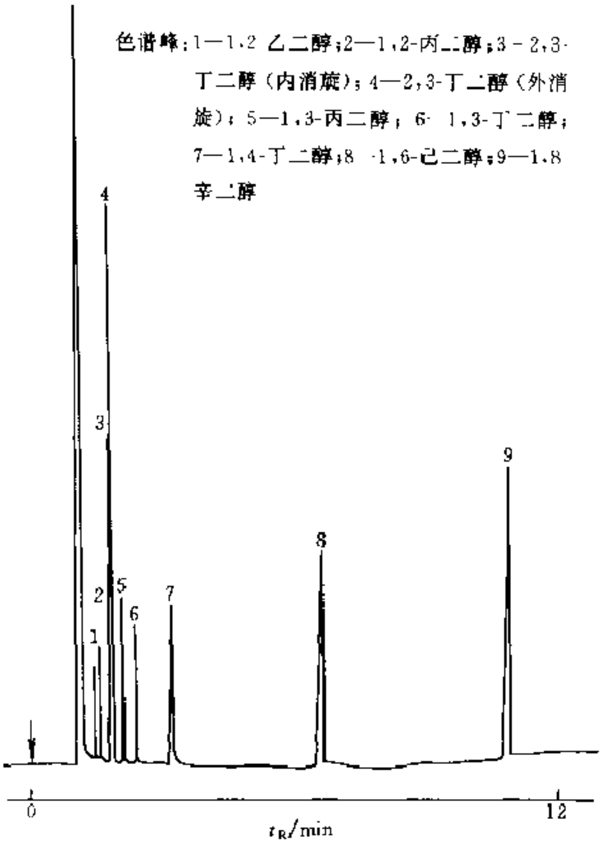
1—单-乙二醇；2—二乙二醇；3—三乙二醇；4—四乙二醇

图 22-23　乙二醇(二)

色谱柱：Carbowax 20m，25m

柱　温：195℃　　气化室温度：265℃

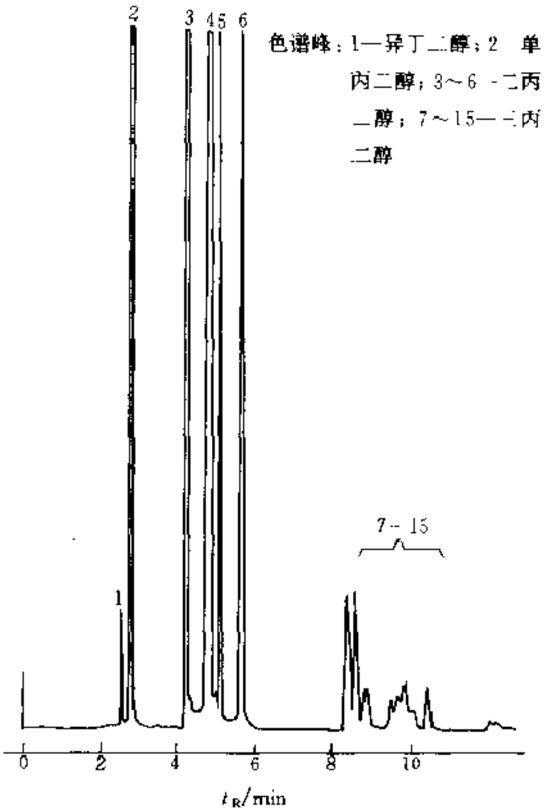
载　气：He　　检测器温度：285℃



色谱峰：1—1,2-乙二醇；2—1,2-丙二醇；3—2,3-丁二醇（内消旋）；4—2,3-丁二醇（外消旋）；5—1,3-丙二醇；6—1,3-丁二醇；7—1,4-丁二醇；8—1,6-己二醇；9—1,8-辛二醇

图 22-24　C_2～C_8 二醇

色谱柱：CP—Sil 5，25m×0.22mm
柱　温：60℃→160℃，80℃·min^{-1}
载　气：N_2，62kPa　　检测器：FID



色谱峰：1—异丁二醇；2—单丙二醇；3～6—二丙二醇；7～15—三丙二醇

图 22-25　丙二醇

色谱柱：Carbowax 20M，25m　气化室温度：275℃
柱　温：180℃　检测器温度：275℃
载　气：He，$\bar{u}$=24cm·s^{-1}
检测器：FID

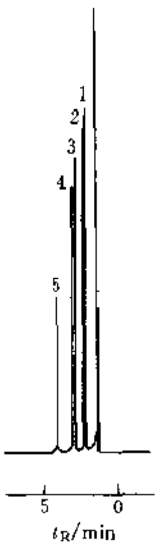


图 22-26　C_3～C_5 二醇(一)[23]

色谱峰：1—2,3-丁二醇；2—1,2-丙二醇；3—1,3-丁二醇；4—1,3-丙二醇；5—1,4-丁二醇
色谱柱：PEG 20M，20m×0.3mm
柱　温：180℃

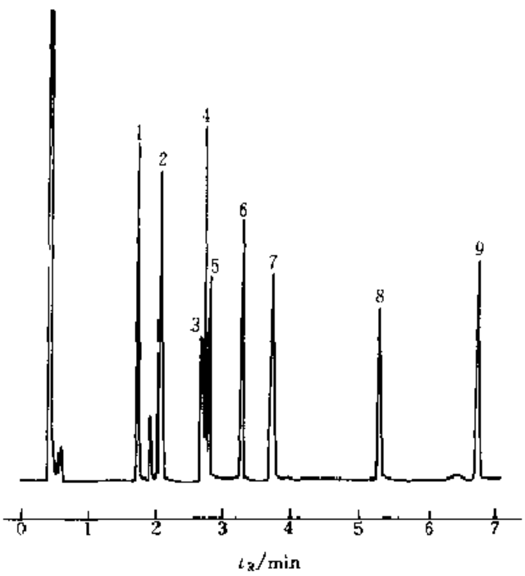


图 22-27　C_3～C_5 二醇(二)[9]

色谱峰：1—2,3-丁二醇；2—1,2-丙二醇；3—未知物；4—1,2-丁二醇；5—2,4-戊二醇；6—1,3-丁二醇；7—1,3-丙二醇；8—1,4-丁二醇；9—1,5-戊二醇
色谱柱：BP 20，12m×0.22mm，d_f=1.0μm
柱　温：110℃→170℃，8℃·min^{-1}
检测器：FID

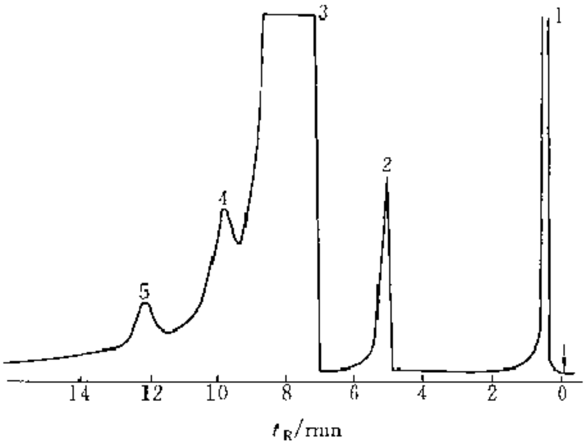


图 22-28　邻甲酚[26]

色谱峰：1—溶剂；2—苯酚；3—邻甲酚；4—间甲酚＋对甲酚；5—2，6-二甲酚

色谱柱：0.13% PEG-20M－0.5% 抗坏血酸＋13% Apiezon L，6201 酸洗担体(40 目～60 目)，3m×4mm

柱　温：130℃

载　气：H_2

检测器：FID

气化室温度：270℃

检测器温度：150℃

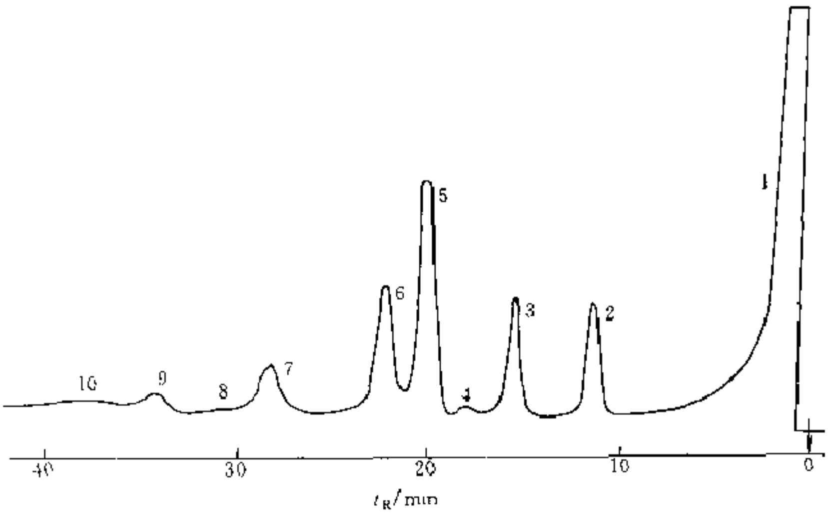


图 22-29　低沸点酚(一)[25]

色谱峰：1—乙醇；2—苯酚；3—邻甲酚；4—2,6-二甲酚；5—间甲酚；6—对甲酚；7—2,4-二甲酚＋2,5-二甲酚；8—萘；9—2,3-二甲酚＋3，5-二甲酚；10—X(乙基酚)

色谱柱：6.5% 液晶 PBOB－0.5% 磷酸，405 硅烷化担体(80 目～100 目)，2m×3mm

柱　温：136℃

载　气：N_2，18ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：270℃

检测器温度：200℃

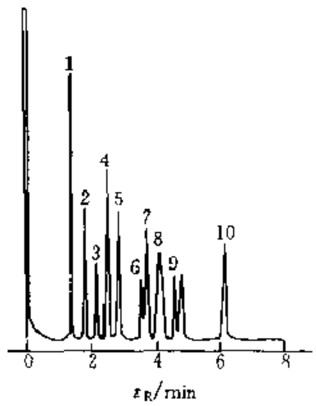


图 22-30　低沸点酚(二)[24]

色谱峰：1—苯酚；2—正癸烷；3—邻甲酚；4—间甲酚＋对甲酚；5—2,6-二甲酚；6—邻乙酚；7—2，4-二甲酚＋2，5-二甲酚；8—3，5-二甲酚＋对乙酚；9—2,3-二甲酚；10—3,4-二甲酚

色谱柱：Heliflex AT 1，10m×0.53mm，d_f＝1.2μm

柱　温：60℃→160℃，5℃·min^{-1}

载　气：He，20ml·min^{-1}

检测器：FID

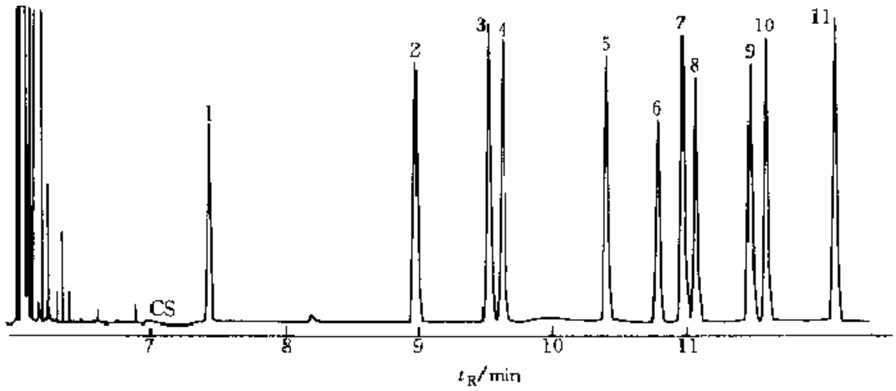


图 22-31　低沸点酚(乙酸酯衍生物)[28

色谱峰：1—苯酚；2--2 甲酚；3--3-甲酚；4—4-甲酚；5--2、6 二甲酚；6 -3-氯酚(内标物)；7—2,5-二甲酚；8—2,4 二甲酚；9 -3,5-二甲酚；10—2,3 二甲酚；11--3,4-二甲酚

色谱柱：5% 苯基甲基硅氧烷，25m×0.31mm，d_f=0.52μm　　检测器：FID

柱　温：从 60℃ 开始，以 8℃·min⁻¹速度程序升温　　气化室温度：250℃

载　气：H_2，40kPa　　检测器温度：300℃

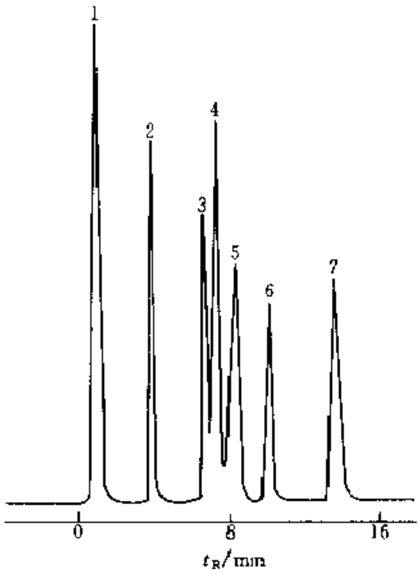


图 22-32　二甲酚(一)[29]

色谱峰：1—溶剂；2—2,6-二甲酚；3—2,5 二甲酚；4—2,4-二甲酚；5—2,3-二甲酚；6—3,5-二甲酚；7—3,4 二甲酚

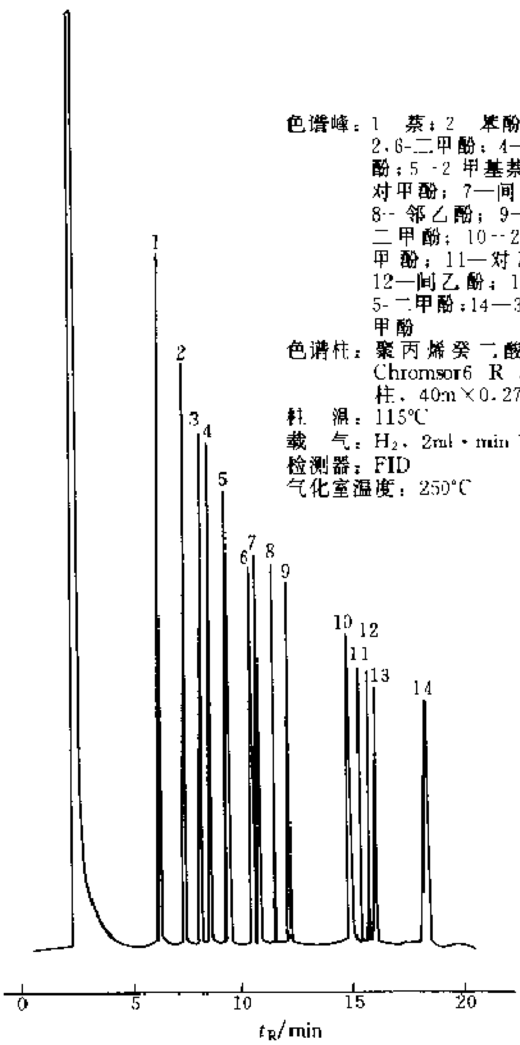
色谱柱：20% 腈苷，Si-O-Cel C_{22} AW（60 目～80 目），2.25m×3mm

柱　温：140℃

载　气：N_2，25ml·min⁻¹

检测器：FID

气化室温度：270℃



色谱峰：1　萘；2　苯酚；3　2,6-二甲酚；4—邻甲酚；5 -2 甲基萘；6　对甲酚；7—间甲酚；8-- 邻乙酚；9—2,5-二甲酚；10--2,3 二甲酚；11—对乙酚；12—间乙酚；13—3,5-二甲酚；14—3,4-二甲酚

色谱柱：聚丙烯癸二酸酯—Chromsor6 R SCOT 柱，40m×0.27mm

柱　温：115℃

载　气：H_2，2ml·min⁻¹

检测器：FID

气化室温度：250℃

图 22-33　二甲酚（二）[30]

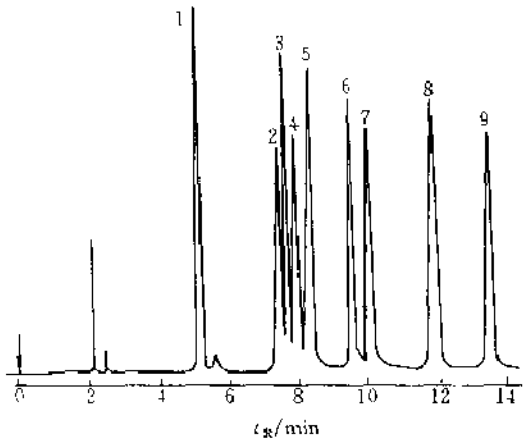


图 22-34 三甲酚(一)[35]

色谱峰：1—2,6-二甲酚；2—2,4,6-三甲酚；3—2,5-二甲酚；4—2,4-二甲酚；5—2,3,6-三甲酚；6—3,5-二甲酚；7—2,3-二甲酚；8—3,4-二甲酚；9—2,3,5-三甲酚

色谱柱：对(对己氧基环己烷羧酸)-4,4′-二苯乙烷二酚酯，25m×0.3mm

柱　温：120℃　　检测器：FID

载　气：N_2，$\bar{u}$=20cm·s^{-1}

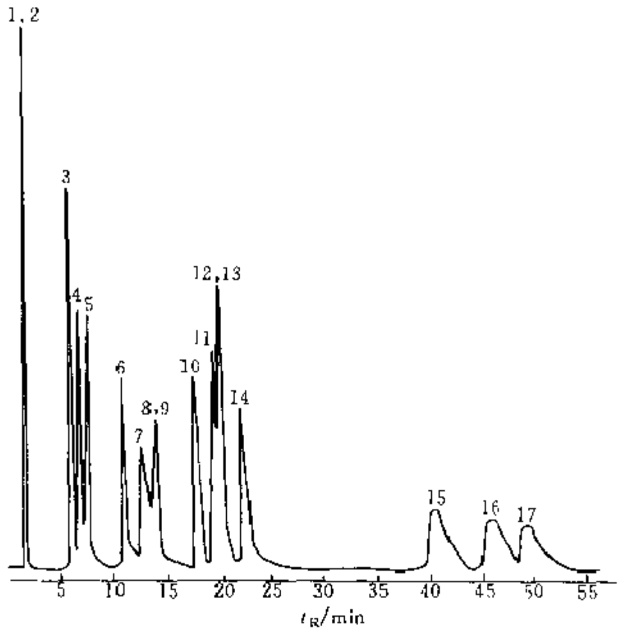


图 22-35 三甲酚(二)[31]

色谱峰：1—苯酚；2—苯甲醚；3—邻甲酚；4—间甲酚；5—对甲酚；6—邻乙酚；7—间乙酚；8—2,4-二甲酚；9—2,5-二甲酚；10—对乙酚；11—3,5-二甲酚；12—2,6-二甲酚；13—2,3-二甲酚；14—3,4-二甲酚；15—2,4,6-三甲酚；16—2,3,6-三甲酚；17—2,3,5-三甲酚

色谱柱：0.3% SP-1000+0.3% H_3PO_4，Carbopak A，2m×2mm

柱　温：165℃ (12min) →195℃，6℃·min^{-1}

载　气：He，25ml·min　　气化室温度：250℃

检测器：FID　　检测器温度：250℃

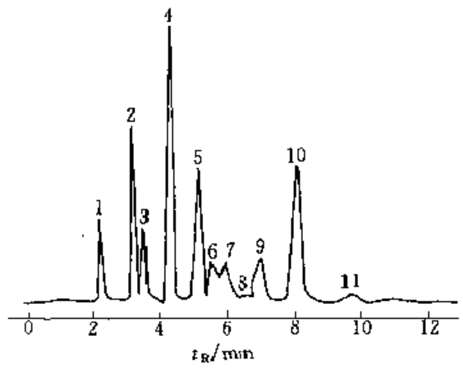


图 22-36 三甲酚(三)[12]

色谱峰：1—苯酚；2—邻甲酚；3—间甲酚+邻甲酚；4—2,6-二甲酚；5—2,4-二甲酚+2,5-二甲酚；6—3,5-二甲酚；7—2,3-二甲酚+间乙酚+对乙酚；8—3,4-二甲酚；9—2,4,6-三甲酚；10—2,3,6-三甲酚；11—2,3,5-三甲酚+2,4,5-三甲酚

色谱柱：10% SP-2100，Supelcoport (100目～120目)，2m×2mm

柱　温：130℃　　气化室温度：175℃

载　气：N_2，20ml·min^{-1}　　检测器温度：175℃

检测器：FID

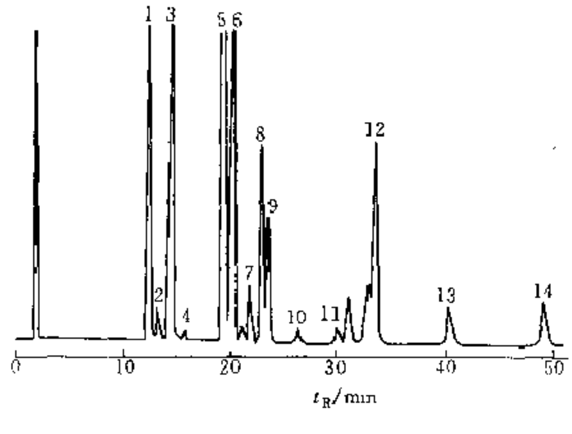


图 22-37 三甲酚(四)[31]

色谱峰：1—苯酚；2—2,6-二甲酚；3—邻甲酚；4—萘；5—对甲酚；6—间甲酚；7—2,4,6-三甲酚；8—2,4-二甲酚；9—2,5-二甲酚；10—2,3,6-三甲酚；11—2,3-二甲酚；12—3,5-二甲酚；13—2,4-二甲酚；14—2,3,5-三甲酚

色谱柱：PSO-DB14C4 (聚硅氧烷侧键冠醚)，30m×0.25mm，d_f=0.32μm

柱　温：110℃

检测器：FID

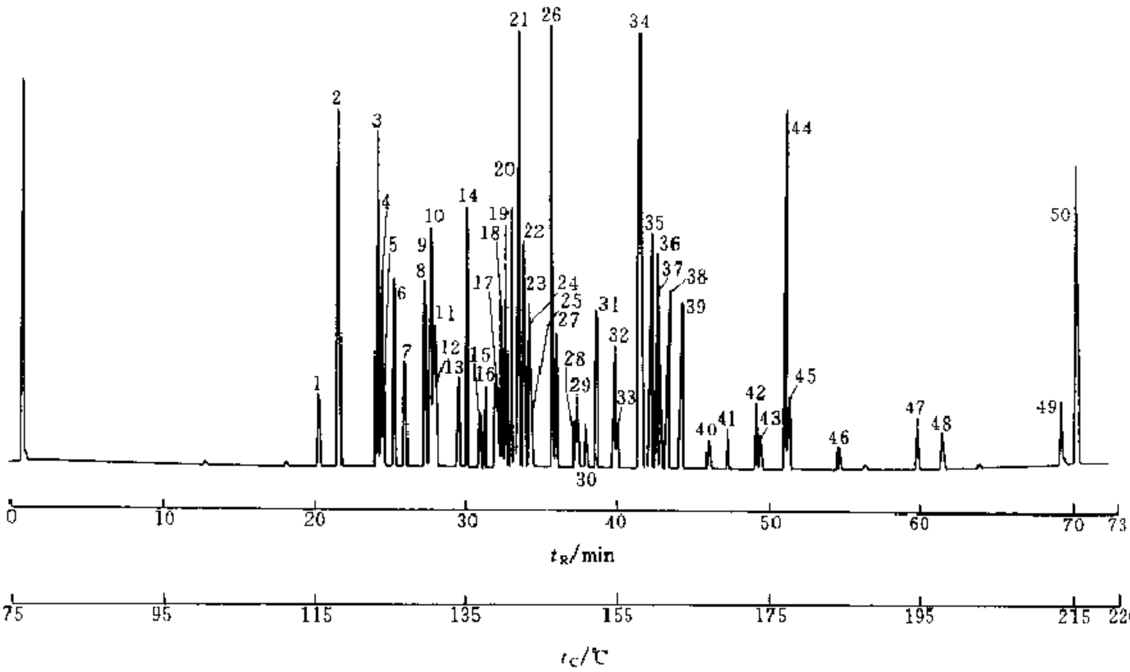


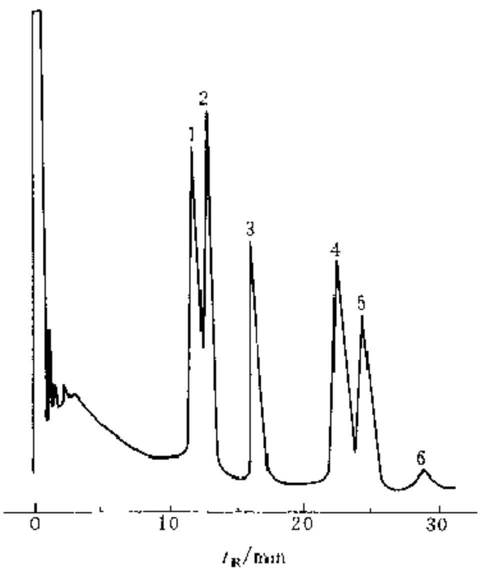
图 22-38　部分酚[35]

色谱峰：1—2,6-二甲基苯酚；2—2,6-二叔丁基苯酚；3—苯酚；4—2-甲基苯酚；5—2,4,6-三甲基苯酚；6—2-叔丁基-6-甲基苯酚；7—2,3,6-三甲基苯酚；8—2,4,6-三叔戊基苯酚+1-茚满酚；9—2-乙基苯酚；10—4-甲基苯酚+2,5-二甲基苯酚；11—4-甲基苯酚；12—3-甲基苯酚；13—2-茚满酚；14—2-异丙基苯酚；15—2,3-二甲基苯酚；16—2-正丙基苯酚；17—4-乙基苯酚+3,5-二甲基苯酚；18—3-乙基苯酚+2,3,5,6-四甲基苯酚；19—1,2,3,4-四氢化-1-萘酚；20—2-仲丁基苯酚；21—2-叔丁基苯酚+2-异丙基-5-甲基苯酚；22—3,4-二甲基苯酚；23—4-异丙基苯酚+2-甲基-5-异丙基苯酚；24—2,3,5-三甲基苯酚；25—3-异丙基苯酚；26—2-叔丁基-4-甲基苯酚；27—4-正丙基苯酚；28—4-叔丁基苯酚；29—3-叔丁基苯酚；30—4-仲丁基苯酚；31—4-色满酚；32—4-茚满酚；33—3,4,5-三甲基苯酚；34—3,5-二异丙基苯酚；35—4-叔戊基苯酚；36—2,3,4,5-四甲基苯酚；37—5-茚满酚；38—6-甲基-4-茚满酚；39—7-甲基-4-茚满酚；40—5,6,7,8-四氢化-1-萘酚；41—7-甲基-5-茚满酚；42—2-苯基苯酚；43—5,6,7,8-四氢化-2-萘酚；44—2-环己基苯酚；45—芝麻酚；46—2-甲基-1-萘酚；47—1-萘酚；48—2-萘酚；49—3-苯基苯酚；50—4-苯基苯酚

色谱柱：Superox 20M，30m×0.20mm，d_f=0.10μm

柱　温：75℃→220℃，2℃·min^{-1}

载　气：He，$\bar{u}$=35cm·s^{-1}



色谱峰：1—1-丙基戊基二硝基酚；2—1-乙基己基二硝基酚；3—1-甲基庚基二硝基酚；4—1-丙基戊基二硝基酚；5—1-乙基己基二硝基酚；6—1-甲基庚基二硝基酚

色谱柱：5% 己二酸二甘醇酯+0.5% H_3PO_4，Chromosorb W（60 目～80 目），2m×6mm

柱　温：215℃

载　气：He，60ml·min^{-1}

检测器：TCD

气化室温度：300℃

检测器温度：275℃

图 22-39　二硝基烷基酚[36]

第二节　有机酸与酯的色谱图

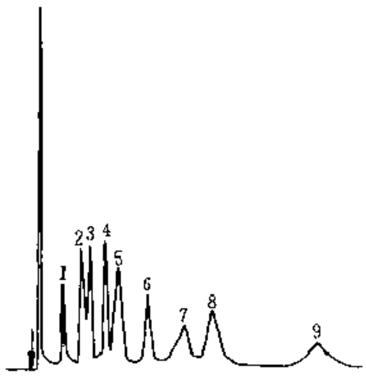


图 22-40　C_1～C_7 脂肪酸[38]

色谱峰：1—乙酸；2—正丙酸；3—异丁酸；4—正丁酸；5—异戊酸；6—正戊酸；7—异己酸；8—正己酸；9—正庚酸

色谱柱：10% PEG-6000，Shimalite TPA（60 目～80 目），2m×3mm

柱　温：150℃

载　气：N_2，55ml・min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：200℃

检测器温度：200℃

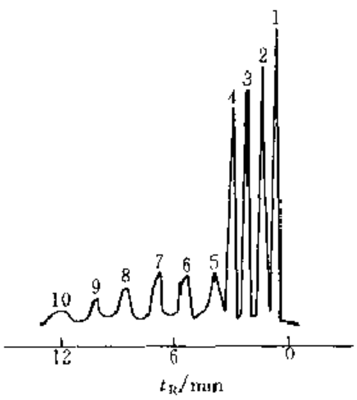


图 22-41　C_1～C_{10}脂肪酸[17]

色谱峰：1—甲酸；2—乙酸；3—正丙酸；4—正丁酸；5—正戊酸；6—正己酸；7—正庚酸；8—正辛酸；9—正壬酸；10—正癸酸

色谱柱：GDX-103（60 目～70 目），2m×3mm

柱　温：182℃

载　气：H_2

检测器：TCD

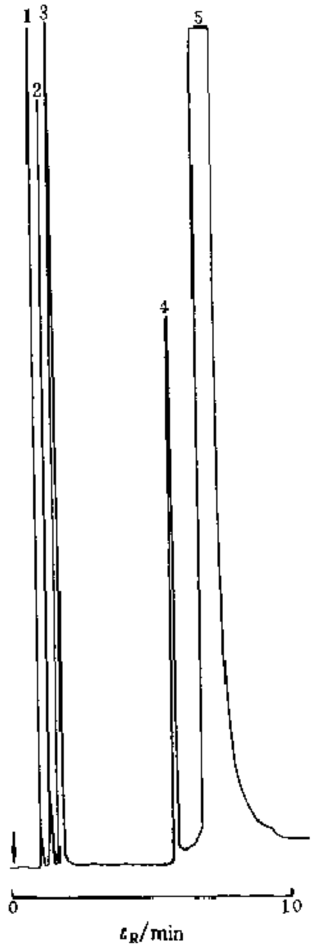


图 22-42　乙酸中杂质[39]

色谱峰：1—乙醛；2—甲酸乙酯；3—乙酸乙酯；4—乙酸酐；5—乙酸

色谱柱：CP-Wax 52CB，25m×0.53mm，d_f=2.0μm

载　气：N_2，10ml・min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：275℃

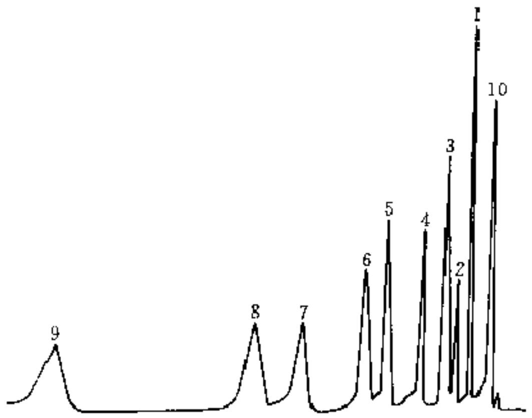


图 22-43　C_2～C_6 脂肪酸[40]

色谱峰：1—异丙醇；2—乙酸；3—丁醇；4—丙酸；5—异丁酸；6—正丁酸；7—异戊酸；8—正戊酸；9—正己酸；10—水

色谱柱：Chromosorb 101(80 目～100 目)，2m×2.5mm

柱　温：201℃　　气化室温度：220℃

载　气：N_2，22ml・min^{-1}　检测器温度：190℃

检测器：FID

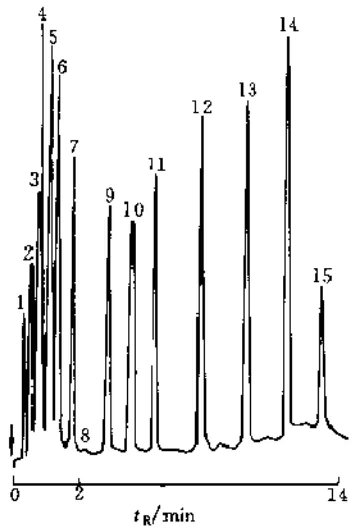


图 22-44　C_2～C_{18}脂肪酸[41]

色谱峰：1—乙酸；2—丙酸；3—异丁酸；4—丁酸；5—异戊酸；6—戊酸；7—己酸；8—庚酸；9—辛酸；10—壬酸；11—癸酸；12—十二酸；13—十四酸；14—十六酸；15—十八酸

色谱柱：CP-Sil 5 CB，10m×0.53mm，d_f=5.0μm

柱　温：100℃→250℃，10℃・min^{-1}

载　气：N_2，10ml・min^{-1}　　检测器：FID

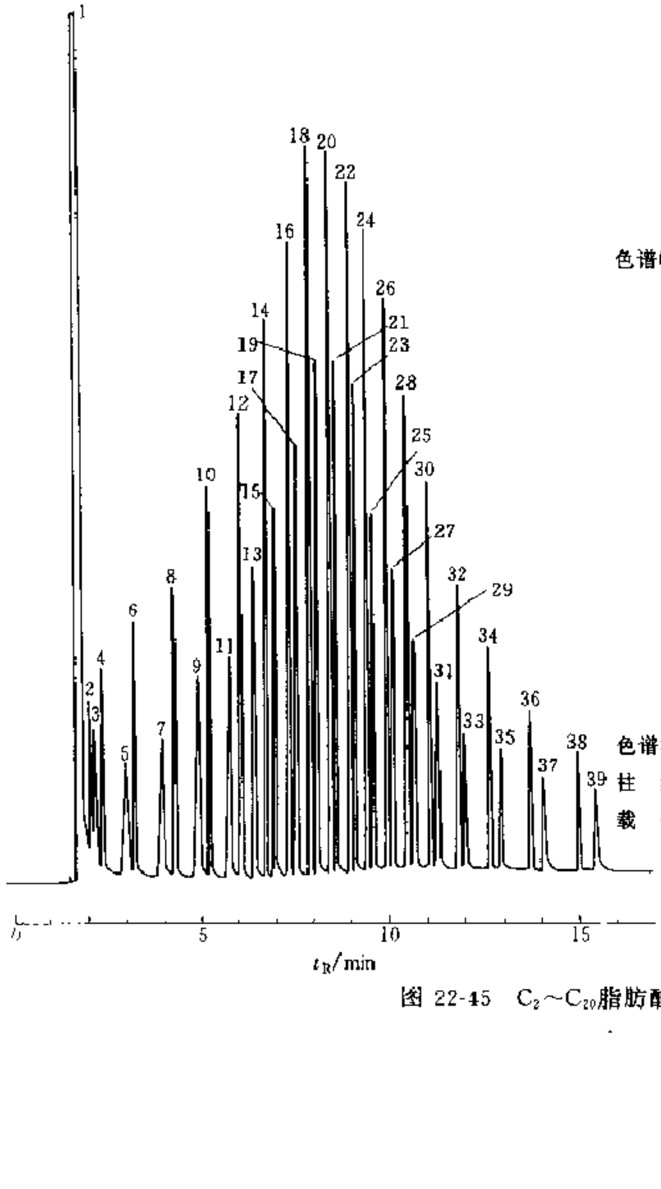


图 22-45　C_2～C_{20}脂肪酸及其甲酯[42]

色谱峰：1—溶剂；2—乙酸甲酯；3—乙酸；4—丙酸甲酯；5—正丙酸；6—丁酸甲酯；7—正丁酸；8—戊酸甲酯；9—正戊酸；10—己酸甲酯；11—正己酸；12—庚酸甲酯；13—正庚酸；14—辛酸甲酯；15—正辛酸；16—壬酸甲酯；17—正壬酸；18—癸酸甲酯；19—正癸酸；20—正十一酸甲酯；21—正十一酸；22—正十二酸甲酯；23—正十二酸；24—正十三酸甲酯；25—正十三酸；26—正十四酸甲酯；27—正十四酸；28—正十五酸甲酯；29—正十五酸；30—正十六酸甲酯；31—正十六酸；32—正十七酸甲酯；33—正十七酸；34—正十八酸甲酯；35—正十八酸；36—正十九酸甲酯；37—正十九酸；38—正二十酸甲酯；39—正二十酸

色谱柱：SE-30，25m×0.22mm

柱　温：50℃(2min)→250℃，30℃・min^{-1}

载　气：N_2，1ml・min^{-1}

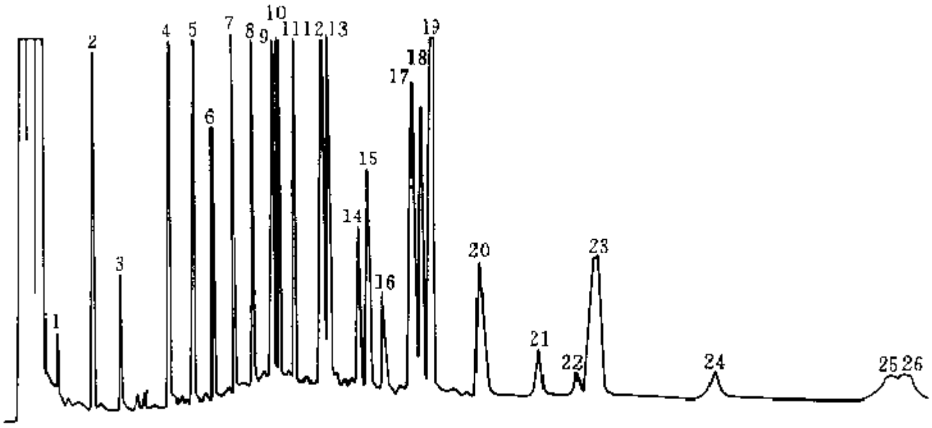


图 22-46 C_6～C_{24}脂肪酸(甲酯衍生物)[43]

色谱峰：1—正己酸；2—正辛酸；3—正壬酸；4—正十一酸；5—正十二酸；6—正十三酸；7—正十四酸；8—正十五酸；9—正十六酸；10—十六碳一烯酸；11—正十七酸；12—正十八酸；13—十八碳一烯酸；14—正十九酸；15—十八碳三烯酸；16—十八碳四烯酸；17—正廿酸；18—廿碳一烯酸；19—正二十一酸；20—廿碳四烯酸；21—二十碳五烯酸；22—正二十二酸；23—二十二碳一酸；24—正二十三酸；25—二十二碳六烯酸；26—正二十四酸

色谱柱：FFAP，30m×0.32mm

柱　温：60℃→190℃，10℃·min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FID

气化室温度：260℃

检测器温度：260℃

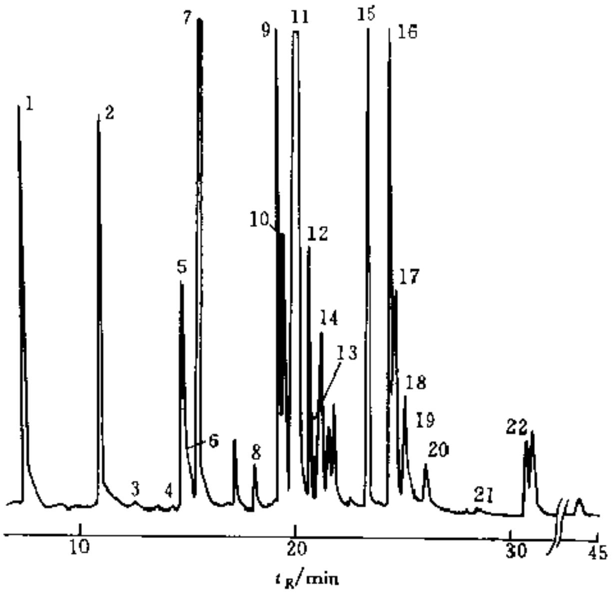


图 22-47 松针叶中脂肪酸（硅烷化衍生物）[44]

色谱峰：1—正十二酸；2—正十四酸；5—十六碳三烯酸(?)；6—棕榈油酸；7—正十六酸；9—十八碳-5,9,12-三烯酸；11—十八碳-9,12-二烯酸；12—十八碳-9-烯酸＋十八碳-9,12,15-三烯酸；13—正十八酸；15—正十九酸(内标物)；16—二十碳-5,11,14三烯酸；17—二十碳-5,11,14,17-四烯酸；18—二十碳-11,14-二烯酸；19—二十碳-8,11,14-三烯酸；20—二十酸；22—二十二酸；3,4,8,10,14,21—未知物

色谱柱：OV-73，25m×0.32mm

柱　温：60℃(1min)→150℃(1min)，10℃·min^{-1}→290℃(10min)，4℃·min^{-1}

载　气：He

检测器温度：300℃

检测器：FID

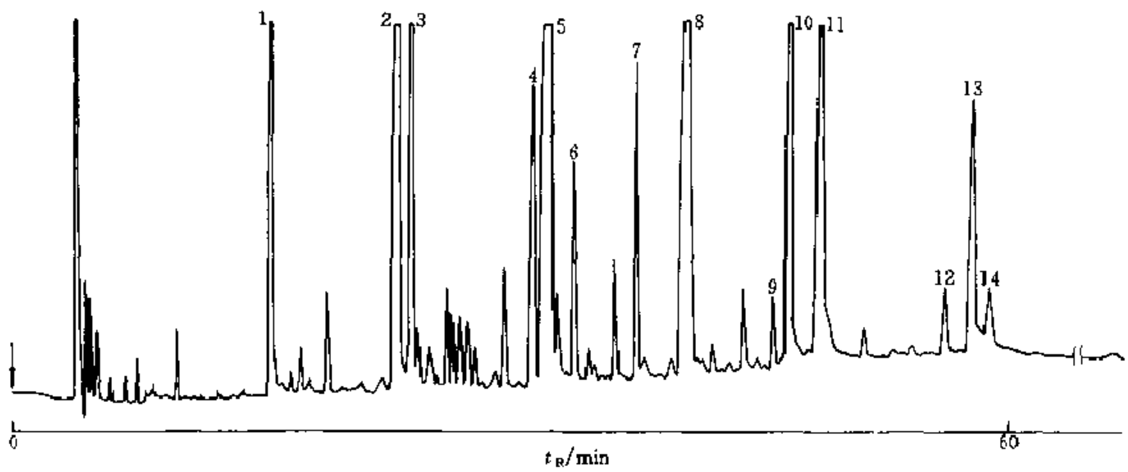


图 22-48　C_{14}～C_{24}脂肪酸

色谱峰：1—正十四酸；2—正十六酸；3—十六碳一烯酸；4—正十八酸；5—十八碳一烯酸；6—十八碳二烯酸；7—十八碳四烯酸；8—二十碳一烯酸；9—二十碳四烯酸；10—二十碳五烯酸；11—二十二碳一烯酸；12—二十二碳五烯酸；13—二十二碳六烯酸；14—二十四碳一烯酸

色谱柱：CP-Wax 51，25m×0.25mm　　　载　气：N_2，50kPa

柱　温：170℃→200℃，1.5℃·min^{-1}　　　检测器：FID

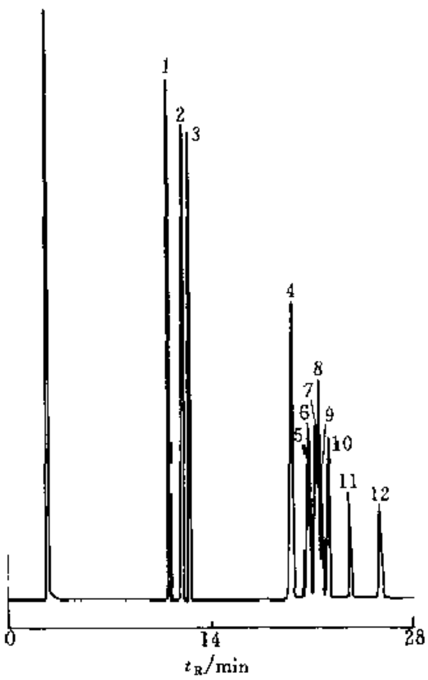


图 22-49　十八碳脂肪酸（甲酯衍生物）[9]

色谱峰：1—正十六酸；2—反棕榈油酸；3—顺棕榈油酸；4—正十八酸；5—反岩芹酸；6—反油酸；7—反瓦克岑酸；8—顺岩芹酸；9—顺油酸；10—顺瓦克岑酸；11—反亚油酸；12—顺亚油酸

色谱柱：BPX70，50m×0.22mm，d_f=0.25μm

柱　温：155℃

检测器：FID

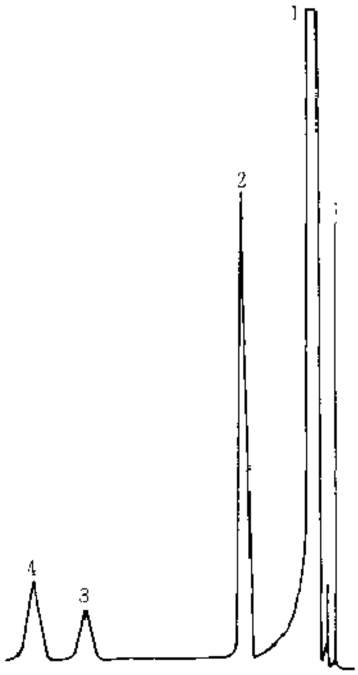


图 22-50　工业丙烯酸[10]

色谱峰：1—丙烯酸；2—富马酸二正丁酯（内标）；3—苯甲酸；4—丙烯酸二聚体

色谱柱：5% 高温硅油 Thermon-1000 + 0.5% 磷酸，Chromosorb W AW-DMCS(80 目～100 目)，3m×3mm

柱　温：170℃

载　气：N_2，50ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：200℃



色谱峰：1—丙烯醛；2—对二氧六环（内标）；3—乙酸；4—糠醛；5—丙酸；6—丙烯酸

色谱柱：10% FFAP + 10% 己二酸新戊二醇聚酯，Chromosorb W AW-DMCS(80 目～100 目)，3m×3mm

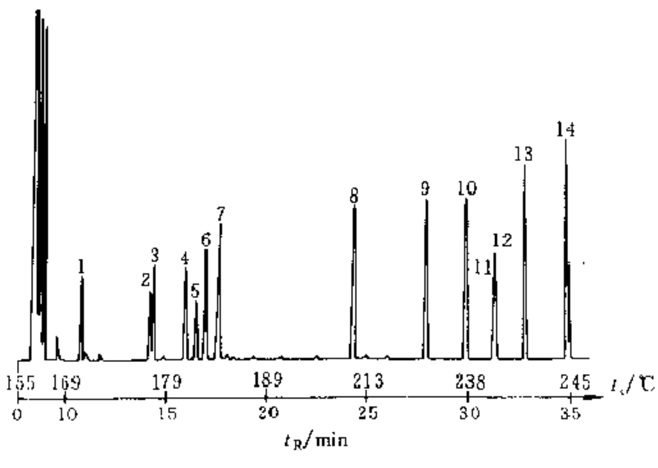
柱　温：130℃

载　气：N_2，50ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：180℃

图 22-51　工业丙烯酸[46]



色谱峰：1—乳酸；2—2-羟基-4-甲基丁酸；3—2-羟基异戊酸；4—2-羟基异己酸；5—1-羟基丁酸；6—2-羟基-3-甲基戊酸；7—2-羟基己酸；8—2-羟基辛酸；9—3-羟基壬酸；10—2-羟基癸酸；11,12—3-羟基-4-甲基癸酸；13—2-羟基十一酸；14—3-羟基十二酸

色谱柱：SPB-1，30m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱　温：153℃(2min)→190℃，2℃·min^{-1}→220℃，5℃·min^{-1}→290℃(20min)，10℃·min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FID

气化室温度：260℃

图 22-52　羟基一元羧酸(TBDMS 衍生物)[16]

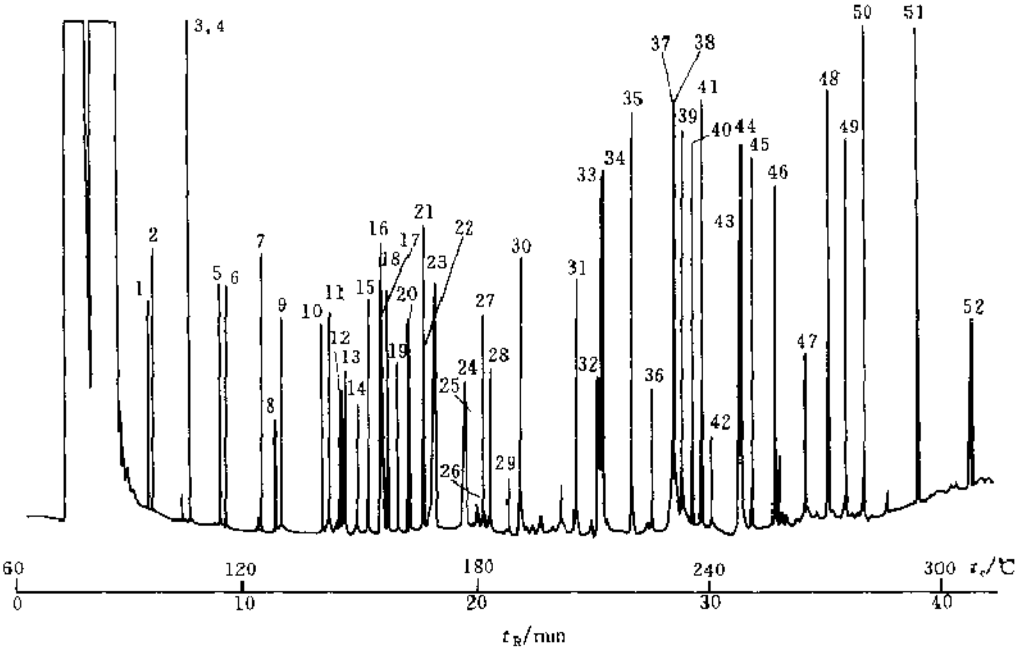


图 22-53　有机酸(氯甲酸乙酯衍生物)[47]

色谱峰：1—3-羟基丁酸；2—2-氧代异戊酸；3—2-氧代甲基戊酸；4—2-氧代异己酸；5—丙二酸；6—甲基丙二酸；7—乙基丙二酸；8—2-羟基乙酸；9—2-羟基丙酸；10—2-羟基丁酸；11—丙氨酸；12—2-羟基异戊酸；13—甘氨酸；14—3-甲基戊二酸；15—2-氨基丁酸；16—2-羟基异戊酸；17—己二酸；18—缬氨酸；19—3-甲基己二酸；20—3-羟基乙酸；21—亮氨酸；22—异亮氨酸；23—十二酸；24—苏氨酸；25—丝氨酸；26—谷氨酸；27—脯氨酸；28—天冬酰胺；29—羟基丁二酸；30—十四酸；31—蛋氨酸；32—4-羟基脯氨酸；33—十六酸；34—十六烯-9-酸；35—苯丙氨酸；36—半胱氨酸；37—十八酸；38—油酸；39—十八碳-9,12-二烯酸；40—十八碳-9,12,15-三烯酸；41—对氯苯丙氨酸（内标物）；42—谷氨酰胺；43—鸟氨酸；44—二十酸；45—花生四烯酸；46—赖氨酸；47—组氨酸；48—二十二碳六烯酸；49—酪氨酸；50—二十四碳烯酸；51—色氨酸；52—半胱氨酸

色谱柱：DB-17HT，30m×0.25mm，d_f=0.15μm　　检测器：FID

柱　温：60℃→300℃（5min），6℃·min^{-1}　　气化室温度：240℃

载　气：H_2，50kPa　　检测器温度：210℃

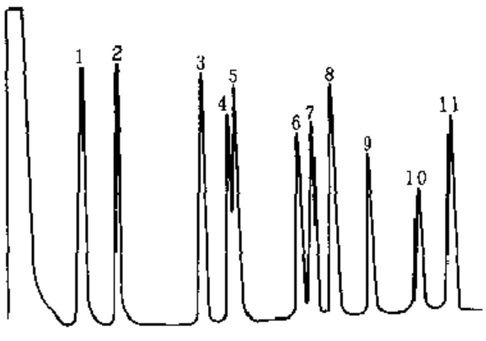


图 22-54　苯羧酸（TMS 衍生物）[48]

色谱峰：1—苯甲酸；2—间-甲苯甲酸；3—邻苯二甲酸；4—间苯二甲酸；5—对苯二甲酸；6—苯联三酸；7—苯偏三酸；8—苯均三酸；9—苯均四酸；10—苯五羧酸；11—苯六羧酸

色谱柱：3% Apiezon L，Chromosorb G AW-DMCS(60 目～80 目)，1m×3mm

柱　温：90℃→260℃，7.5℃·min^{-1}　　检测器：FID

载　气：He，55ml·min^{-1}　　气化室温度：240℃

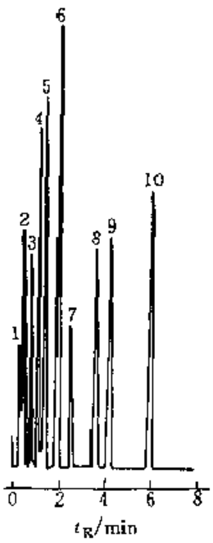


图 22-55　C_1～C_6 脂肪酸甲酯[49]

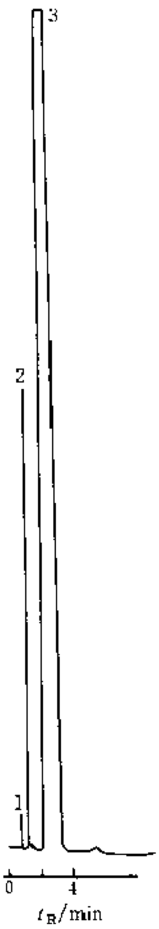
色谱峰：1—甲酸甲酯；2—乙酸甲酯；3—丙酸甲酯；4—异丁酸甲酯；5—丁酸甲酯；6—异戊酸甲酯；7—戊酸甲酯；8—异己酸甲酯；9—己酸甲酯；10—正癸烷

色谱柱：Heliflex AT-1，10m×0.53mm，d_f=1.2μm

柱　温：40℃→100℃，5℃·min^{-1}

载　气：He，5ml·min^{-1}

检测器：FID



色谱峰：1—水；2—甲醇；3—乙酸甲酯

色谱柱：10%聚己二酸乙二醇酯，上海试剂厂401有机担体(60目～80目)，2m×4mm

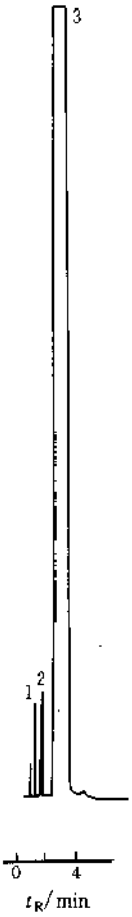
柱　温：115℃

载　气：H_2，$30ml \cdot min^{-1}$

检测器：TCD

气化室温度：250℃

图 22-56　工业乙酸甲酯[50]



色谱峰：1—水；2—乙醇；3—乙酸乙酯

色谱柱：10%聚己二酸乙二醇酯，上海试剂厂401有机担体(60目～80目)，2m×4mm

柱　温：130℃

载　气：H_2，$30ml \cdot min^{-1}$

检测器：TCD

气化室温度：250℃

检测器温度：130℃

图 22-57　工业乙酸乙酯[50]

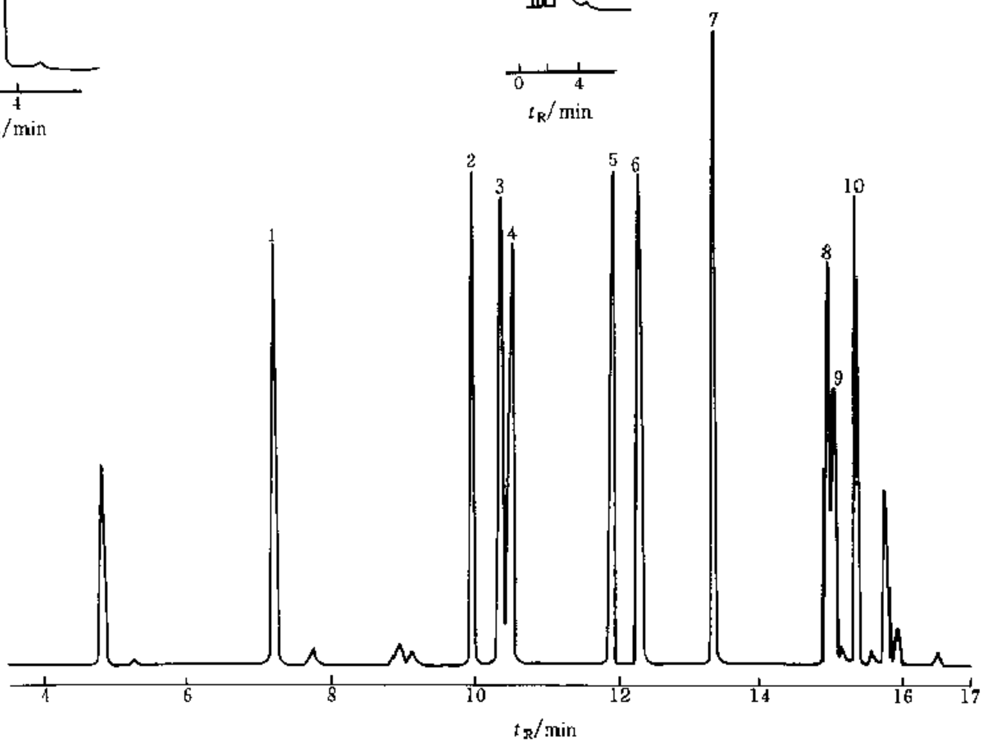


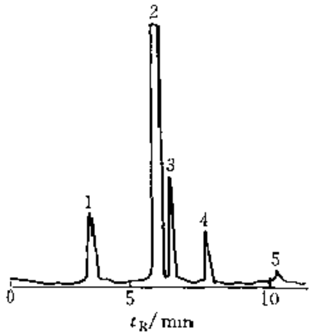
图 22-58　乙酸酯——NIOSH 方法 1450[51]

色谱峰：1—乙酸乙酯；2—丙烯酸乙酯；3—乙酸叔丁酯；4—乙酸丙酯；5—乙酸仲丁酯；6—乙酸异丁酯；7—乙酸丁酯；8—乙酸异戊酯；9—乙酸戊酯；10—乙酸-2-乙氧基乙酯

色谱柱：DB-1，30m×0.32mm，d_f=3.0μm　　检测器：FID

柱　温：40℃ (5min) →130℃，$10℃ \cdot min^{-1}$　　气化室温度：250℃

载　气：He，$\bar{u}=35cm \cdot s^{-1}$ (40℃)　　检测器温度：300℃



色谱峰：1—二氯氢酯；2—顺邻叔丁基环己酯；3—反-邻叔丁基环己酯；4—对叔丁基环己酯；5—2,6-二叔丁基环己酯

色谱柱：PEG 20M，21m×0.25mm

柱　温：150℃→230℃，4℃·min^{-1}

载　气：N_2，$\bar{u}$=15cm·s^{-1}

检测器：FID

气化室温度：300℃

检测器温度：280℃

图 22-59　乙酸邻叔丁基环己酯[52]

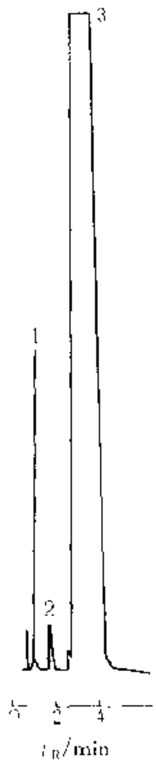


图 22-60　工业乙酸异丙酯[50]

色谱峰：1—水；2—异丙醇；3—乙酸异丙酯

色谱柱：10% 聚己二酸乙二醇酯，上海试剂厂 401 有机担体(60 目～80 目)，2m×4mm

柱　温：145℃

载　气：H_2，30ml·min^{-1}

检测器：TCD

气化室温度：250℃

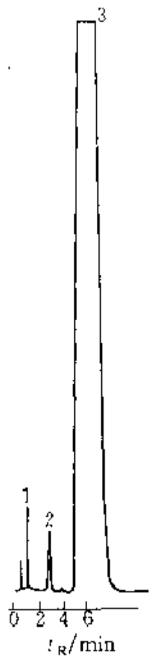


图 22-61　工业乙酸正丙酯[50]

色谱峰：1—水；2—正丙醇；3—乙酸正丙酯

色谱柱：10% 聚己二酸乙二醇酯，上海试剂厂 401 有机担体(60 目～80 目)，2m×4mm

柱　温：145℃

载　气：H_2，30ml·min^{-1}

检测器：TCD

气化室温度：250℃

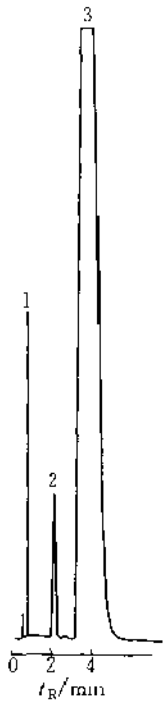


图 22-62　工业乙酸异丁酯[50]

色谱峰：1—水；2—异丁醇；3—乙酸异丁酯

色谱柱：10% 聚己二酸乙二醇酯，上海试剂厂 401 有机担体(60 目～80 目)，2m×4mm

柱　温：160℃

载　气：H_2，30ml·min^{-1}

检测器：TCD

气化室温度：250℃

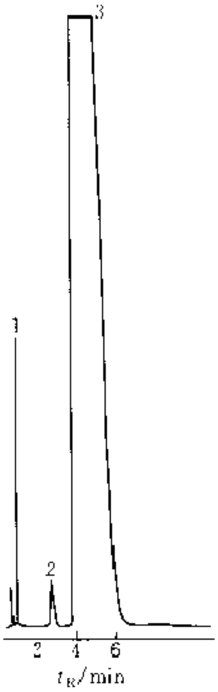


图 22-63 工业乙酸正丁酯[55]

色谱峰：1—水；2—正丁醇；3—乙酸正丁酯

色谱柱：10% 聚己二酸乙二醇酯，上海试剂厂 401 有机担体（60 目～80 目），2m×4mm

柱 温：160℃

载 气：H_2，30ml·min^{-1}

检测器：TCD

气化室温度：250℃

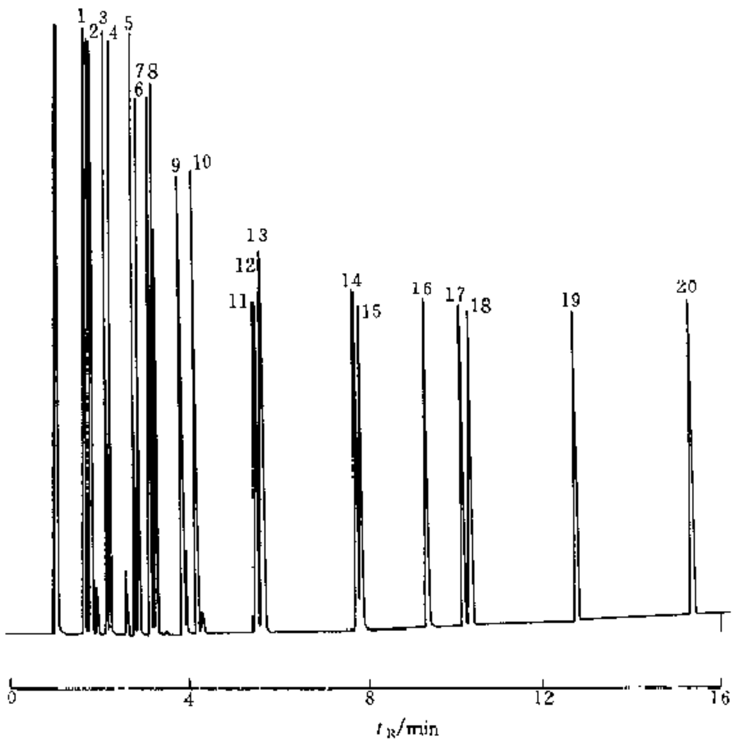


图 22-64 部分酯[9]

色谱峰：1—乙酸叔丁酯；2—甲酸丙酯；3—乙酸丙酯；4—乙酸仲丁酯；5—丙酸丙酯；6—异丁酸丙酯；7—乙酸正丁酯；8—丙酸异丁酯；9—丁酸丙酯；10—丙酸正丁酯；11—2-乙基丁酸丙酯；12—丁酸正丁酯；13—戊酸丙酯；14—戊酸正丁酯；15—己酸丙酯；16—2-乙基己酸丙酯；17—己酸正丁酯；18—庚酸丙酯；19—庚酸正丁酯；20—辛酸正丁酯

色谱柱：BP20，25m×0.22mm，d_f=0.25μm

柱 温：50℃→130℃，5℃·min^{-1}

检测器：FID

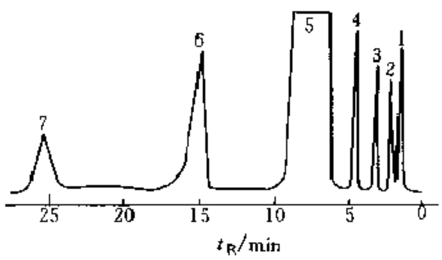


图 22-65 丙烯酸甲酯[55]

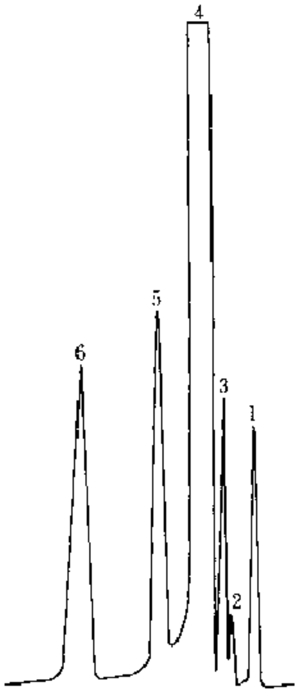
色谱峰：1—甲醚；2—甲醇；3—乙醇；4—丙烯腈；5—丙烯酸甲酯；6—丙烯酸；7—β-甲氧基丙酸甲酯

色谱柱：GDX 1，3m+20% Carbowax 20M，上海试剂厂 402 担体，柱长 1m

柱 温：150℃

载 气：N_2，30ml·min^{-1}

检测器：FID



色谱峰：1—乙酸甲酯；2—甲醇；3—丙酸甲酯；4—丙烯酸甲酯；5—丙烯酸乙酯；6—对二氧六环（内标）
色谱柱：10% PEG-20M，白色硅藻土 Shimalita(60 目～80 目)，4m×3mm
柱 温：64℃
载 气：N_2，50ml·min^{-1}
检测器：FID
气化室温度：140℃
检测器温度：120℃

图 22-66 工业丙烯酸甲酯[54]

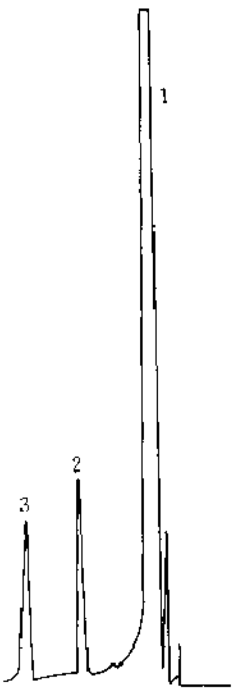


图 22-67 工业丙烯酸甲酯[54]
色谱峰：1—丙烯酸甲酯；2—丙烯酸正丁酯（内标）；3—甲氧基丙酸甲酯
色谱柱：5% 高温硅油＋0.5%磷酸，Chromosorb W AW-DMCS (80 目～100 目)，3m×3mm
柱 温：70℃
载 气：N_2，50ml·min^{-1}
检测器：FID
气化室温度：140℃
检测器温度：120℃

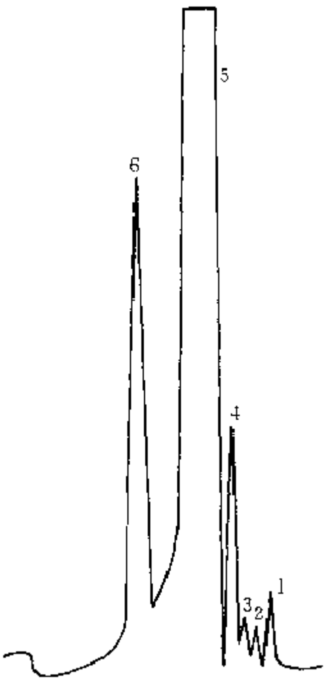


图 22-68 工业丙烯酸乙酯[55]
色谱峰：1—乙酸乙酯；2—乙醇；3—丙烯酸甲酯；4—丙酸乙酯；5—丙烯酸乙酯；6—对二氧六环（内标）
色谱柱：20% PEG-20M，白色硅藻土 Shimalite 担体（60 目～80 目），4m×3mm
柱 温：70℃
载 气：N_2，50ml·min^{-1}
检测器：FID
气化室温度：140℃
检测器温度：120℃

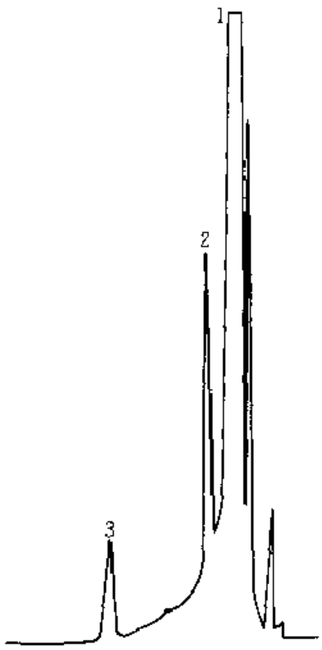


图 22-69 工业丙烯酸乙酯[56]
色谱峰：1—丙烯酸乙酯；2—丙烯酸正丁酯（内标）；3—乙氧基丙酸乙酯
色谱柱：5% 高温硅油 Thermon-1000＋0.5% 磷酸，Chromosorb W AW-DMCS(80 目～100 目)，3m×3mm
柱 温：92℃
载 气：N_2，50ml·min^{-1}
检测器：FID
气化室温度：140℃
检测器温度：120℃



图 22-70　工业丙烯酸正丁酯[55]

色谱峰：1—乙酸乙酯（内标）；2—二丁基醚；3—乙酸正丁酯；4—甲基正丁基酮；5—正丁醇；6—丙烯酸异丁酯；7—丙酸正丁酯；8—丙烯酸正丁酯

色谱柱：10% FFAP + 10% 己二酸新戊二醇聚酯，Chromosorb W AW-DMCS(80 目～100 目)，3m×3mm

柱　温：86°C

载　气：N_2，50ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：180°C

检测器温度：160°C

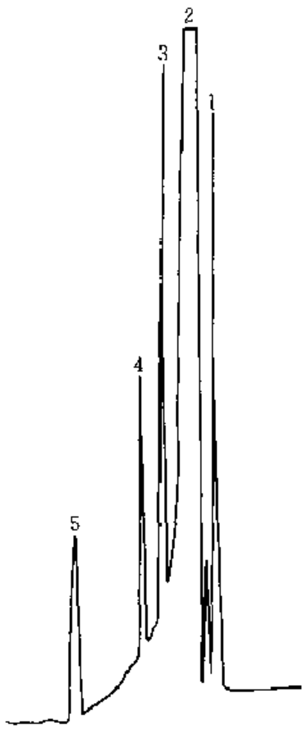


图 22-71　工业丙烯酸正丁酯[56]

色谱峰：1—乙酸乙酯（内标）；2—丙烯酸正丁酯；3—糠醛；4—未知峰；5—丁氧基丙酸正丁酯

色谱柱：5% 高温硅油 Thermon-1000 + 0.5% 磷酸，Chromosorb W AW-DMCS(80 目～100 目)，3m×3mm

柱　温：120°C

载　气：N_2，60ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：180°C

检测器温度：160°C

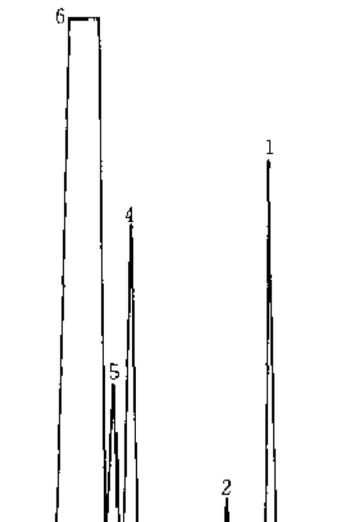


图 22-72　工业丙烯酸-2-乙基己酯[57]

色谱峰：1—乙酸乙酯（内标）；2—未知峰；3—乙酸-2-乙基己酯；4—2-乙基己醇；5—丙酸-2-乙基己酯；6—丙烯酸-2-乙基己酯

色谱柱：5% FFAP + 15% 己二酸新戊二醇聚酯，Chromosorb W AW-DMCS(80 目～100 目)，3m×3mm

柱　温：140°C

载　气：N_2，50ml·min^{-1}　　气化室温度：180°C

检测器：FID　　检测器温度：160°C

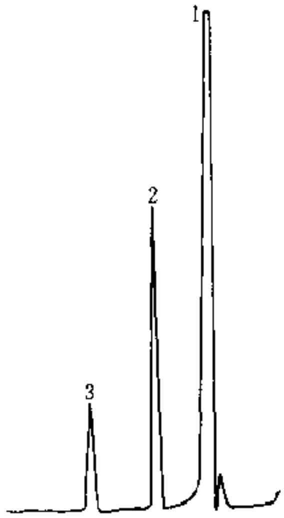


图 22-73　工业丙烯酸-2-乙基己酯[57]

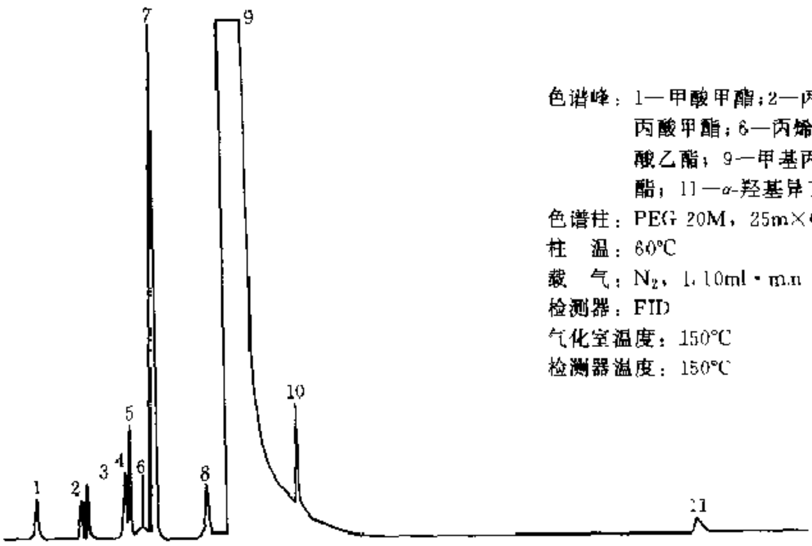
色谱峰：1—丙烯酸-2-乙基己酯；2—富马酸二正丁酯（内标）；3—2-乙基己氧基丙酸-2-乙基己酯

色谱柱：5% 高温硅油 Thermon-1000 + 0.5% 磷酸，Chromosorb W AW-DMCS(80 目～100 目)，3m×3mm

柱　温：180°C

载　气：N_2，40ml·min^{-1}　　气化室温度：210°C

检测器：FID　　检测器温度：190°C



色谱峰：1—甲酸甲酯；2—丙酮；3—乙酸甲酯；4—甲醇；5 丙酸甲酯；6—丙烯酸甲酯；7—异丁酸甲酯；8—丙酸乙酯；9—甲基丙烯酸甲酯；10—甲基丙烯酸乙酯；11—α-羟基异丁酸甲酯
色谱柱：PEG 20M，25m×0.33mm，d_f = 0.50μm
柱　温：60°C
载　气：N_2，1.10ml・min；分流比＝110：1
检测器：FID
气化室温度：150°C
检测器温度：150°C

图 22-74　甲基丙烯酸甲酯微量杂质[58]

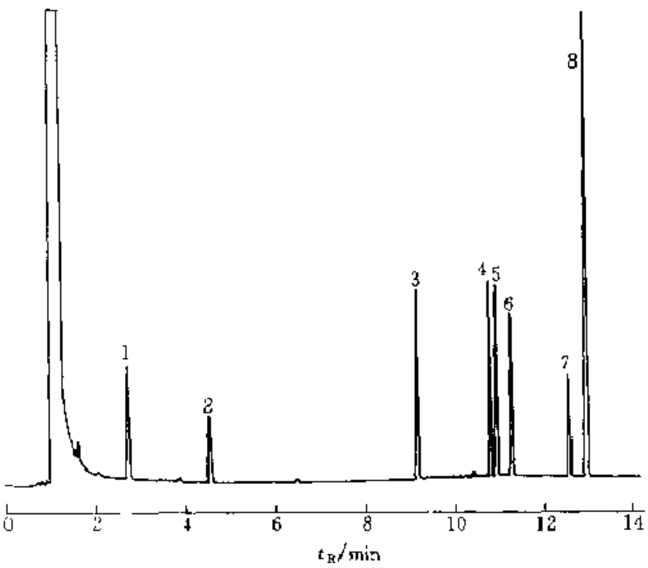


图 22-75　异丁烯酸溴代十--烷基酯中杂质[59]
色谱峰：1--异丁烯酸甲酯；2-异丁烯酸异丙酯；3-十-烷醇；4 异丁烯酸十一烷基酯；5--异丁烯酸 10-溴代十一烷基酯；6—11-溴代十一烷醇；7—异丁烯酸-10-溴代十一烷基酯；8--异丁烯酸 10-溴代十--烷基酯
色谱柱：DB-5，30m×0.53mm，d_f=1.5μm
柱　温：50°C(3min)→260°C(4min)，25°C・min^{-1}→300°C(1min)，30°C・min^{-1}
载　气：He，12.5ml・min^{-1}　　检测器温度：310°C
检测器：FID　　进样方式：热柱上进样
气化室温度：275°C

色谱峰：
1--辛酸甲酯；2—壬酸甲酯；3—癸酸甲酯；4—月桂酸甲酯；5--肉豆蔻酸甲酯；6—棕榈酸甲酯；7--棕榈油酸甲酯；8—硬脂酸油酯；9—油酸甲酯；10--亚油酸甲酯；11-亚麻酸甲酯

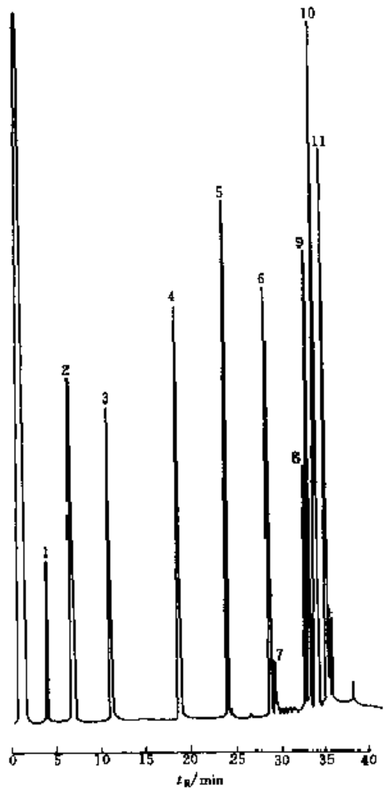


图 22-76　C_8～C_{18}脂肪酸甲酯[65]
色谱柱：Carbowax 20M，13m×0.25mm，d_f=1μm
柱　温：80°C(5min)→220°C，5°C・min^{-1}
载　气：N_2，$\bar{u}$=10cm・s^{-1}
检测器：FID

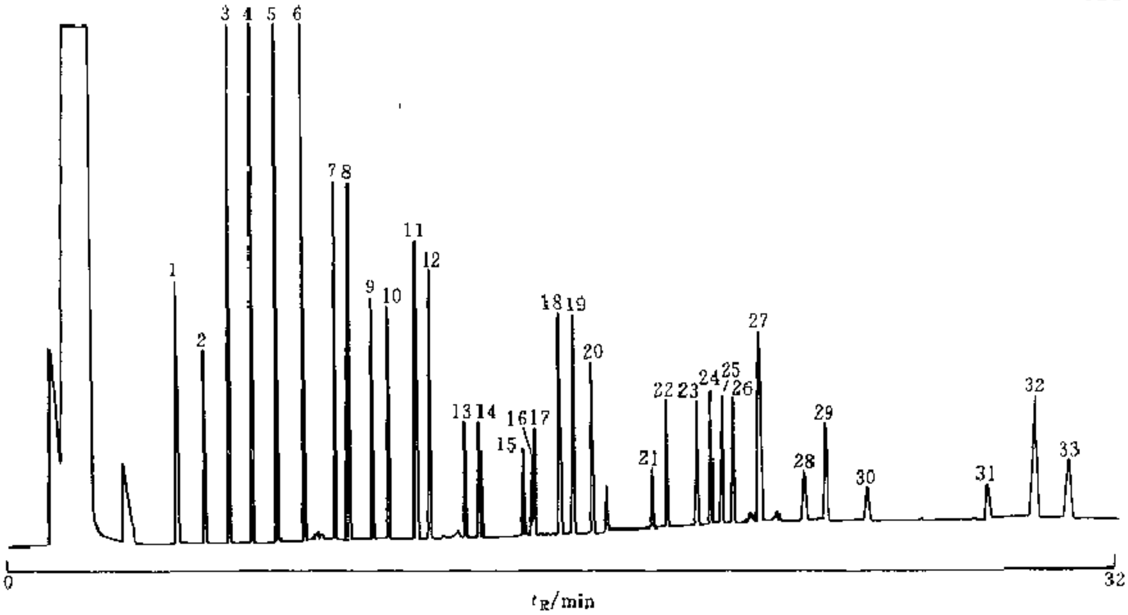


图 22-77 C_8～C_{24}脂肪酸甲酯[51]

色谱峰：1—辛酸甲酯；2—壬酸甲酯；3—癸酸甲酯；4—十一烷酸甲酯；5—月桂酸甲酯；6—十三烷酸甲酯；7—肉豆蔻酸甲酯；8—肉豆蔻脑酸甲酯；9—十五烷酸甲酯；10—十五碳-10-烯酸甲酯；11—棕榈酸甲酯；12—棕榈油酸甲酯；13—十七烷酸甲酯；14—十七碳-10-烯酸甲酯；15—硬脂酸甲酯；16—反油酸甲酯；17—顺油酸甲酯；18—亚油酸甲酯；19—γ-亚油酸甲酯；20—亚麻酸甲酯；21—花生酸甲酯；22—二十碳-11-烯酸甲酯；23—二十碳-11，14-二烯酸甲酯；24—高-γ-亚油酸甲酯；25—花生四烯酸甲酯；26—二十碳-11，14，17-三烯酸甲酯；27—全顺二十碳-5，8，11，14，17-五烯酸甲酯；28—山萮酸甲酯；29—芥酸甲酯；30—二十二碳-13，16-二烯酸甲酯；31—全顺二十二碳-4，7，10，13，16，19-六烯酸甲酯；32—二十四烷酸甲酯；33—神经酸甲酯

色谱柱：DB-225，30m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱　温：70℃（1min）→180℃，20℃·min^{-1}→220℃（15min），3℃·min^{-1}

载　气：He，40℃·s^{-1}（70℃）　　气化室温度：250℃

检测器：FID　　检测器温度：300℃

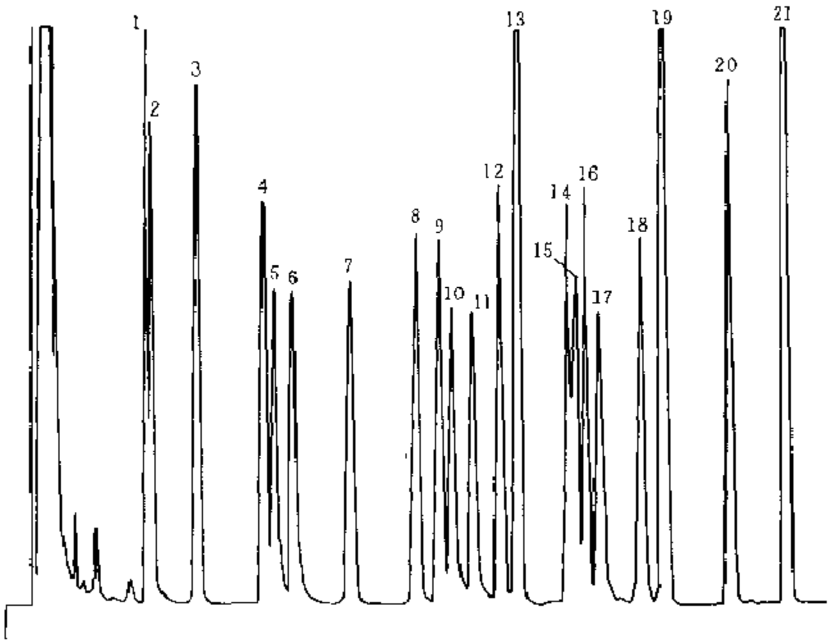


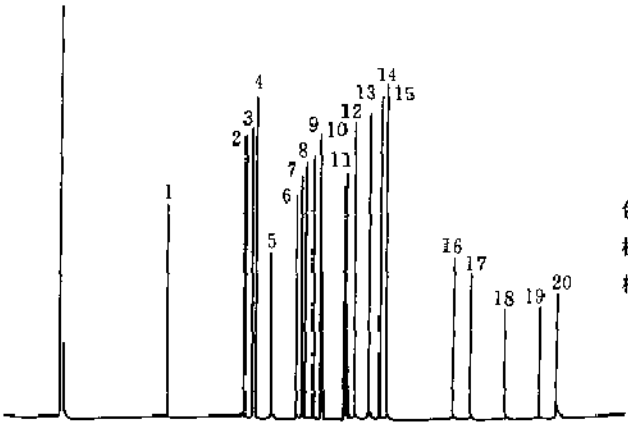
图 22-78 C_{11}～C_{20}脂肪酸甲酯[52]

色谱峰：1—十一酸甲酯；2—2-羟基癸酸甲酯；3—十二酸甲酯；4—十三酸甲酯；5—2-羟基十二酸甲酯；6—3-羟基十二酸甲酯；7—十四酸甲酯；8—12-甲基十四酸甲酯；9—十五酸甲酯；10—2-羟基十四酸甲酯；11—3-羟基十四酸甲酯；12—十六烯酸甲酯；13—十六酸甲酯；14—14-甲基十六酸甲酯；15—*dl*-顺-9,10-甲基十六酸甲酯；16—十七酸甲酯；17—2-羟基十六酸甲酯；18—十八烯酸甲酯；19—十八酸甲酯；20—十九酸甲酯；21—二十酸甲酯

色谱柱：2% OV-101，Chromosorb W HP（100目～120目），3.33m×2mm

柱　温：160℃→178℃（2min），3℃·min^{-1}→220℃（2min），7℃·min^{-1}→260℃，10℃·min^{-1}

载　气：N_2，30ml·min^{-1}　　检测器：FID



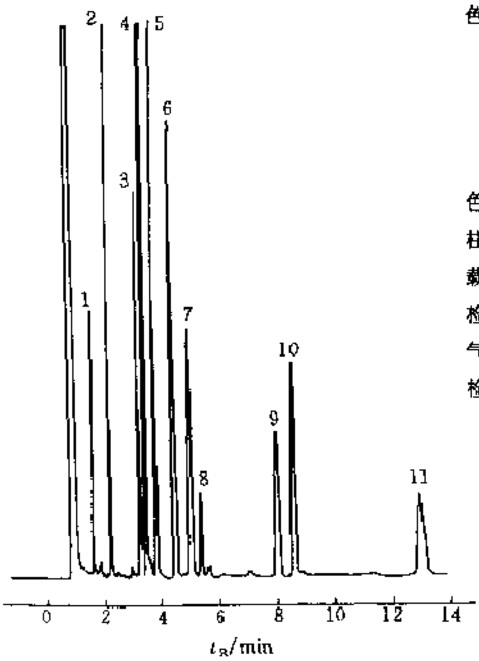
色谱峰：1—正十三酸甲酯；2—正十六酸甲酯；3—反棕榈油酸甲酯；4—顺棕榈油酸甲酯；5—正十七酸甲酯；6—正十八酸甲酯；7—反油酸甲酯；8—顺油酸甲酯；9—反亚油酸甲酯；10—顺亚油酸甲酯；11—二十酸甲酯；12—二十碳一烯酸甲酯；13—二十碳二烯酸甲酯；14—二十碳三烯酸甲酯；15—二十碳四烯酸甲酯；16—二十五酸甲酯；17—二十六酸甲酯；18—二十八酸甲酯；19—三十酸甲酯；20—三十一酸甲酯

色谱柱：BP×70，25m×0.22mm，d_f=0.25μm

柱　温：100 ℃→300 ℃（5min），4 ℃・min^{-1}

检测器：FID

图 22-79　C_{13}～C_{31}脂肪酸甲酯[83]



色谱峰：1—正十四酸甲酯；2—正十六酸甲酯；3—正十八酸甲酯；4—十八碳一烯酸甲酯；5—十八碳二烯酸甲酯；6—十八碳三烯酸甲酯；7—正二十酸甲酯；8—二十碳一烯酸甲酯；9—正二十二酸甲酯；10—二十二碳一烯酸甲酯；11—正二十四酸甲酯

色谱柱：Supelcowax 10，30m×0.53mm，d_f=1.0μm

柱　温：240 ℃

载　气：He，5ml・min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250 ℃

检测器温度：260 ℃

图 22-80　C_{14}～C_{24}脂肪酸甲酯[84]

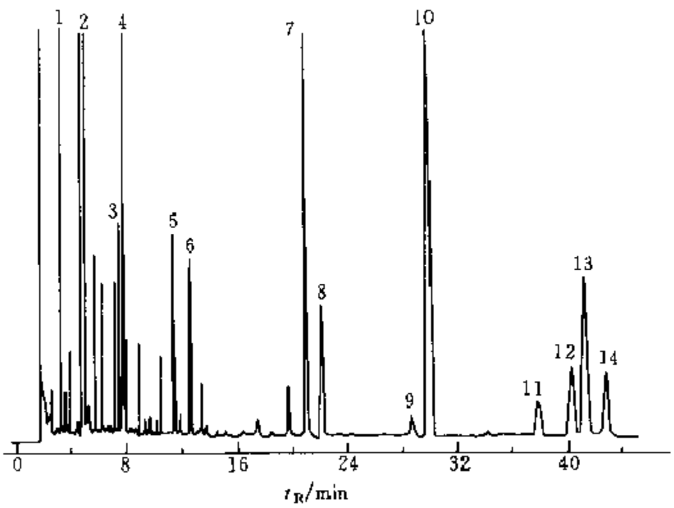


图 22-81　C_{14}～C_{24}脂肪酸甲酯[64]

色谱峰：1—正十四酸甲酯；2—正十六酸甲酯；3—正十八酸甲酯；4—油酸甲酯；5—十八碳四烯酸甲酯；6—正二十酸甲酯；7—二十碳五烯酸甲酯；8—正二十二酸甲酯；9—二十一碳五烯酸甲酯；10—正二十二酸甲酯；11—二十二碳五烯酸甲酯；12—正二十四酸甲酯；13—二十二碳六烯酸甲酯；14—神经酸甲酯

色谱柱：Omegawax 320，30m×0.32mm，d_f=0.25μm

柱　温：200℃　　检测器：FID

载　气：He，$\bar{u}$=25cm·s^{-1}　检测器温度：260℃

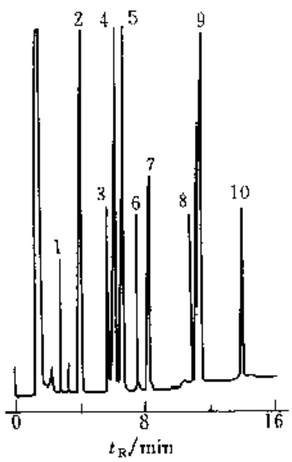


图 22-82　C_{14}～C_{24}脂肪酸甲酯[26]

色谱峰：1—肉豆蔻酸甲酯；2—棕榈酸甲酯；3—硬脂酸甲酯；4—油酸甲酯；5—亚油酸甲酯；6—亚麻酸甲酯；7—花生酸甲酯；8—山嵛酸甲酯；9—芥酸甲酯；10—二十四烷酸甲酯

色谱柱：Heliflex AT-Wax，25m×0.25mm，d_f=0.2μm

柱　温：180℃→240℃，5℃·min^{-1}

载　气：H_2，0.8ml·min^{-1}



图 22-83　C_{16}～C_{18}脂肪酸甲酯[66]

色谱峰：1—棕榈酸甲酯；2—硬脂酸甲酯；3—油酸甲酯；4—亚油酸甲酯；5—亚麻酸甲酯

色谱柱：Heliflex AT-225，10m×0.53mm，d_f=1.2μm

柱　温：170℃

载　气：He，8ml·min^{-1}

检测器：FID

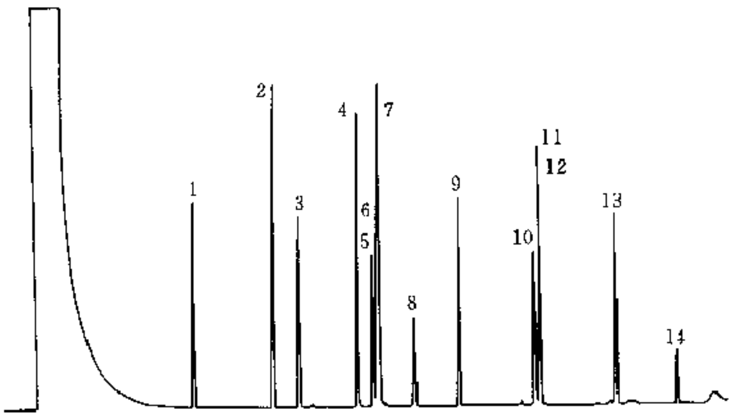


图 22-84　C_{16}～C_{24}脂肪酸（氯代甲酸甲酯衍生物）[67]

色谱峰：1—十四酸；2—十六酸；3—棕榈油酸；4—十八酸；5—反油酸；6—岩芹酸；7—顺油酸；8—亚油酸；9—亚麻酸；10—巴西烯酸；11—芥酸；12—二十碳四烯酸；13—神经酸；14—二十二碳六烯酸

色谱柱：CP-Sil 88，25m×0.25mm，d_f=0.2μm

柱　温：130℃（1min）→240℃，10℃·min^{-1}

载　气：He

检测器：FID

气化室温度：270℃

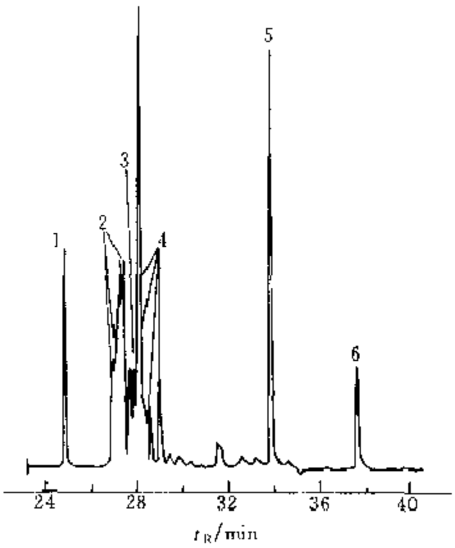


图 22-85 脂肪酸甲酯异构物[64]

色谱峰：1—C18：0；2—C18：1反式异构物；3—C18：1顺式和反式异构物；4—C18：1顺式异构物；5—C18：2；6—C20：0

色谱柱：SP 2560，100m×0.25mm，d_f—0.20μm

柱　温：175℃

载　气：He，$\bar{u}$=20cm·s^{-1}（175℃）

检测器：FID

气化室温度：200℃

检测器温度：200℃

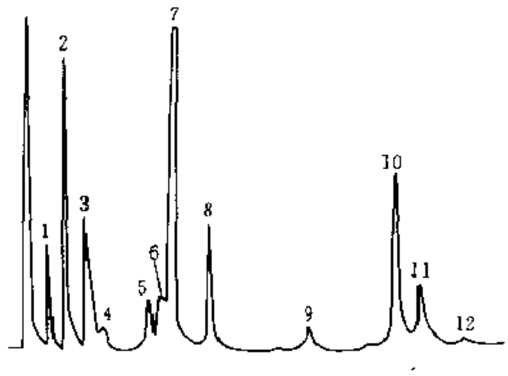


图 22-86 脂肪酸甲酯[69]

色谱峰：1—丙酮酸甲酯；2—乳酸甲酯；3—乙醇酸甲酯；4—草酸二甲酯；5—丙二酸二甲酯；6—反-丁烯二酸二甲酯；7—乙酰丙酸甲酯；8—顺-丁烯二酸二甲酯；9—苹果酸二甲酯；10—酒石酸二甲酯；11—柠檬酸三甲酯；12—吡咯烷羧酸甲酯

色谱柱：5%新戊二醇丁二酸酯，Chromosorb W HMDS，0.83m×3mm

柱　温：64℃→186℃，5℃·min^{-1}

载　气：He，50ml·min^{-1}

检测器：FID

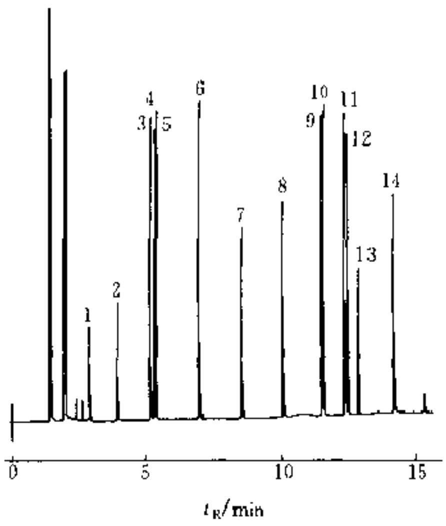


图 22-87 二羧酸二甲酯[19]

色谱峰：1—草酸二甲酯；2—丙二酸二甲酯；3—富马酸二甲酯；4—丁二酸二甲酯；5—马来酸二甲酯；6—戊二酸二甲酯；7—己二酸二甲酯；8—庚二酸二甲酯；9—辛二酸二甲酯；10—邻苯二酸二甲酯；11—对苯二酸二甲酯；12—间苯二酸二甲酯；13—壬二酸二甲酯；14—癸二酸二甲酯

色谱柱：BPI，25m×0.22mm，d_f=0.25μm

柱　温：60℃→240℃，10℃·min^{-1}

检测器：FID

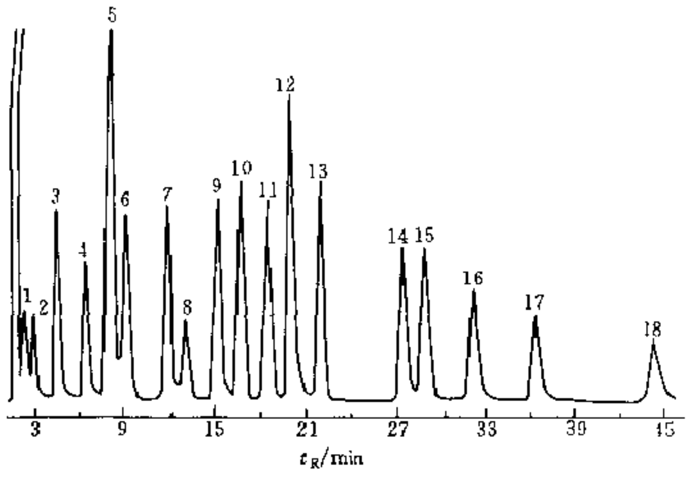


图 22-88 二羧酸甲酯和苯多酸甲酯[71]

色谱峰：1—草酸甲酯；2—丙二酸甲酯；3—琥珀酸甲酯；4—戊二酸甲酯；5—苯甲酸甲酯；6—己二酸甲酯；7—庚二酸甲酯；8—萘；9—辛二酸甲酯；10—邻苯二甲酸甲酯；11—壬二酸甲酯；12—间苯二酸甲酯；13—癸二酸甲酯；14—苯连三酸甲酯；15—苯偏三酸甲酯；16—苯均三酸甲酯；17—苯均四酸甲酯；18—苯五酸甲酯

色谱柱：15% Apiezon N，Chromaton N AW-DMCS（0.16目～0.20目），3m×4mm

柱　温：150℃→270℃，3.25℃·min^{-1}

载　气：He，50ml·min^{-1}　　检测器：FID

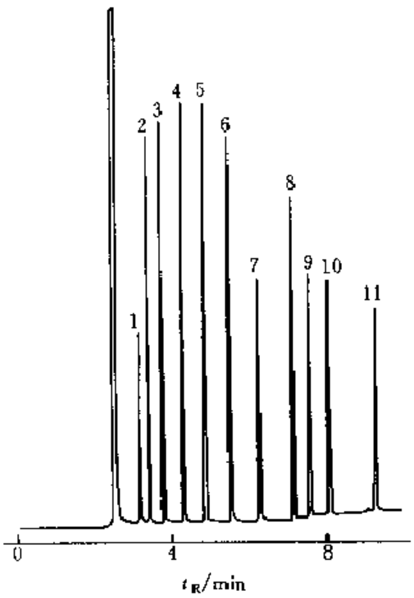


图 22-89 二元酸甲酯[72]

色谱峰：1—苹果酸二甲酯；2—丁二酸二甲酯；3—戊二酸二甲酯；4—己二酸二甲酯；5—庚二酸二甲酯；6—辛二酸二甲酯；7—壬二酸二甲酯；8—癸二酸二甲酯；9—对苯二酸二甲酯；10—间苯二酸二甲酯；11—邻苯二酸二甲酯

色谱柱：SP-2380，30m×0.25mm

柱　温：170 ℃→200 ℃，4 ℃·min^{-1}

载　气：He，$\bar{u}$=20cm·s^{-1}

检测器：FID

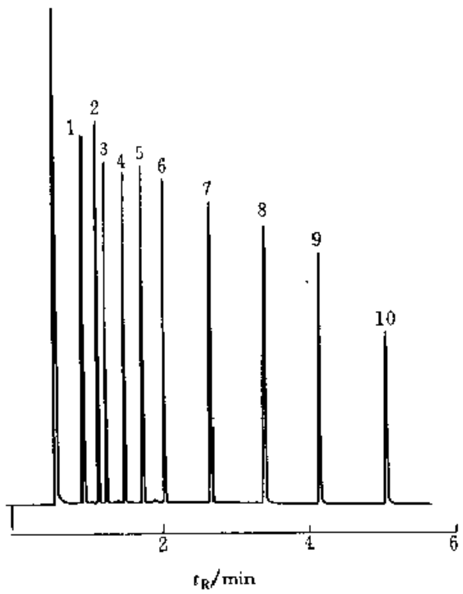


图 22-90 苯二甲酸酯

色谱峰：1—苯二甲酸二甲酯；2—苯二甲酸二乙酯；3—苯二甲酸二异丙酯；4—苯二甲酸二正丙酯；5—苯二甲酸二异丁酯；6—苯二甲酸二正丁酯；7—苯二甲酸二正戊酯；8—苯二甲酸二己酯；9—苯二甲酸二庚酯；10—苯二甲酸二辛酯

色谱柱：BP21，12m×0.22mm，d_f=0.25μm

柱　温：200 ℃→280 ℃，20 ℃·min^{-1}

检测器：FID

第三节　酮、醛与醚的色谱图

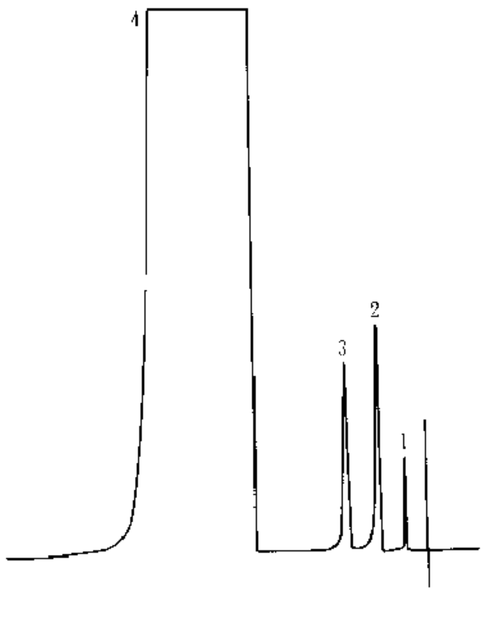


图 22-91 工业丙酮[73]

色谱峰：1—空气；2—水；3—甲醇；4—丙酮

色谱柱：GDX-104（80 目～100 目），2m×4mm

柱　温：124 ℃

载　气：H_2，42ml·min^{-1}

检测器：TCD

气化室温度：150 ℃

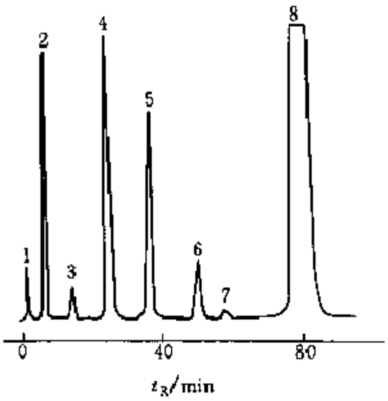


图 22-92 丙酮中杂质[74]

色谱峰：1—非芳烃碳氢化合物；2—乙醚；3—二异丙基醚；4—乙醇；5—丙醛；6—正丁醛；7—乙酸乙酯；8—丙酮

色谱柱：25% 甲酰胺，硅藻土担体（0.25mm～0.35mm），3.4m×6mm

柱　温：40 ℃

载　气：N_2，132ml·min^{-1}

检测器：FID

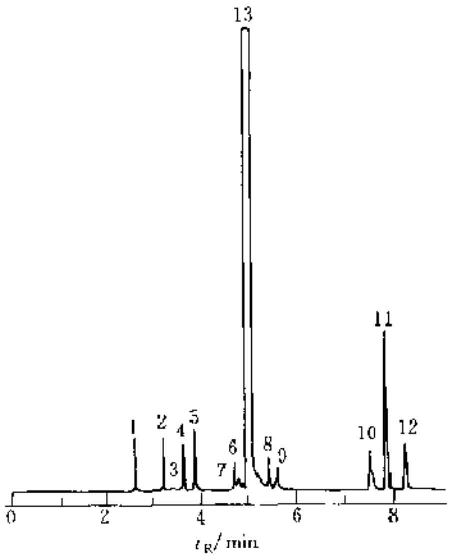


图 22-93　甲基乙基酮的杂质[75]

色谱峰：1—二异丙基醚；2—二丙基醚；3—仲-丁基醚；4—丙酮；5—1-辛烯；6—乙酸乙酯；7—甲醇；8—异丙醇；9—乙醇；10—叔丁醇；11—仲丁醇；12—正丙醇；13—甲基乙基酮

色谱柱：Supelcowax 10，30m×0.32mm，d_f=0.50μm

柱　温：50℃（4min）→100℃，8℃·min⁻¹

载　气：He，$\bar{u}$=25cm·s⁻¹

检测器：FID

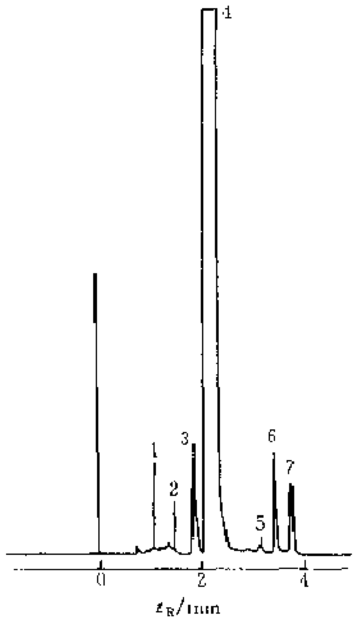


图 22-94　甲基异丁基酮的杂质[75]

色谱峰：1—丙酮；2—2-丙醇；3—2-戊酮+3-戊酮；4—甲基异丁基酮；5—α-异亚丙基丙酮；6—β-异亚丙基丙酮；7—甲基异丁基甲醇

色谱柱：Supelcowax 10，30m×0.32mm，d_f=0.25μm

柱　温：70℃

载　气：He，u=25cm·s⁻¹

检测器：FID

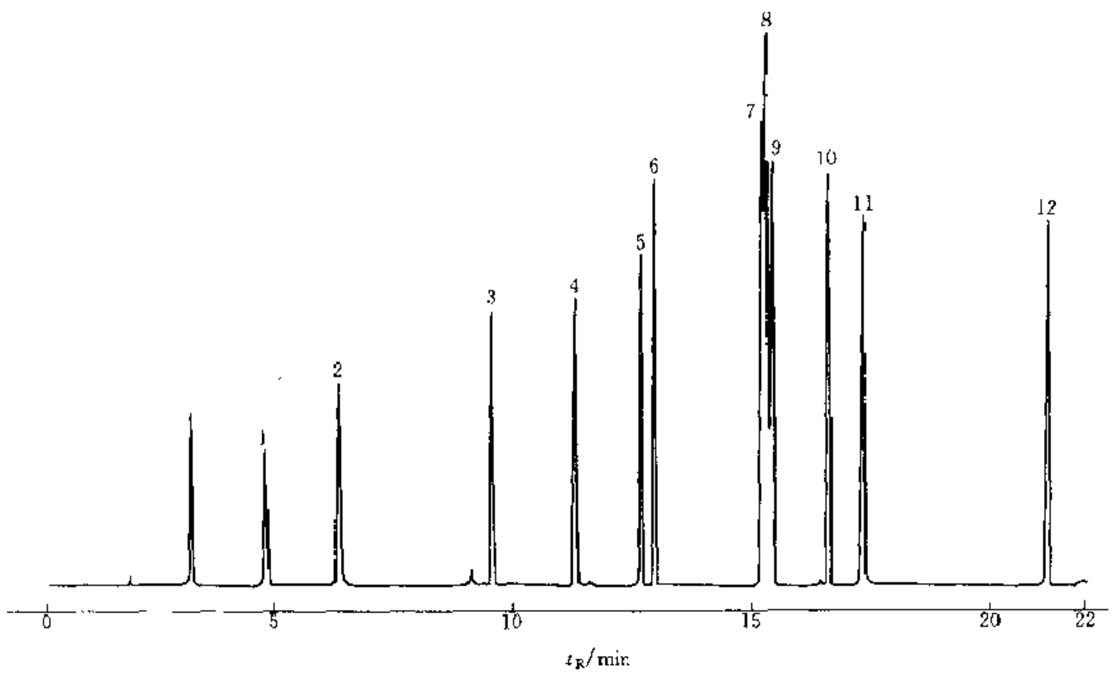


图 22-95　酮——NIOSH 方法 1300～1301[51]

色谱峰：1—丙酮；2—甲乙酮；3—戊酮-2；4—甲基异丁基酮；5—2-己酮；6—异亚丙基丙酮；7—乙基丁基酮；8—甲基戊基酮；9—环己酮；10—乙基戊基酮；11—二异丁基酮；12—2-壬酮

色谱柱：DB-1，30m×0.32mm，d_f=3.0μm

柱　温：40℃（5min）→210℃，10℃·min⁻¹

载　气：He，$\bar{u}$=35cm·s⁻¹（40℃）

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：300℃

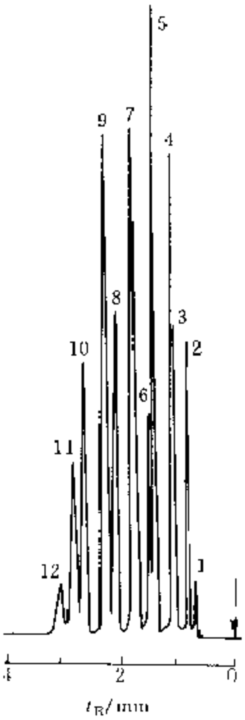


图 22-96　部分脂肪酮[77]

色谱峰：1—丙酮；2—2-丁酮；3—3-戊酮；4—2-戊酮；5—4-甲基-2-戊酮；6—2,2-二甲基-3-戊酮；7—4-甲基-3-戊烯-2-酮；8—环戊酮；9—4-庚酮；10—3-庚酮；11—2-庚酮；12—环己酮

色谱柱：1% Carbowax 20M，Pollosil HC（30μm～40μm），1.2m×3mm

柱　温：122℃

检测器：FID

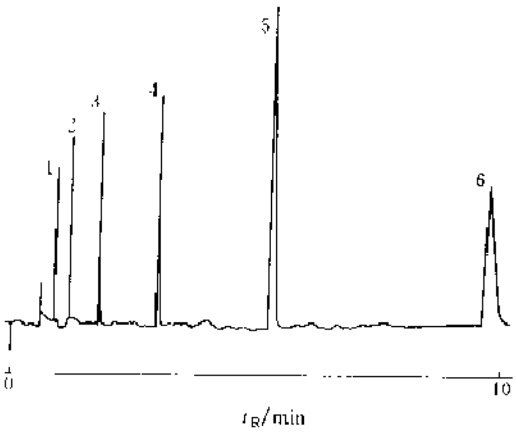


图 22-97　C_3～C_8 酮[4]

色谱峰：1—丙酮；2—丁酮；3—戊酮；4—己酮；5—庚酮；6—辛酮

色谱柱：PoraPLOT Q，25m×0.32mm

柱　温：210℃　　检测器：FID

载　气：H_2

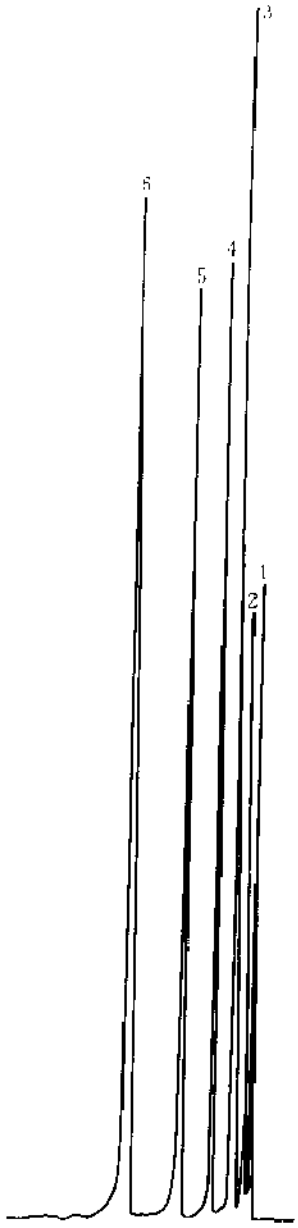


图 22-98　C_6～C_{11}脂肪酮[78]

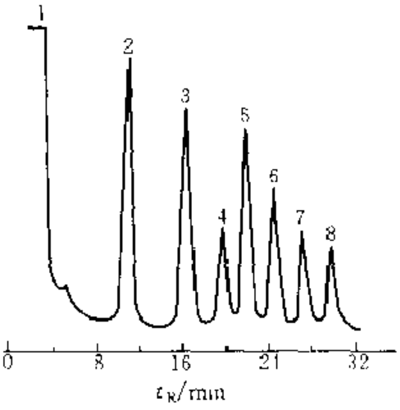
色谱峰：1—2-己酮；2—2-庚酮；3—2-辛酮；4—2-壬酮；5—2-癸酮；6—2-十一酮

色谱柱：甲基乙烯基硅氧烷，18m×0.27mm

柱　温：110℃

载　气：N_2，$\bar{u}$=39.1cm·s^{-1}

检测器：FID



色谱峰：1—丙酮；2—5-壬酮；3—6-十一酮；4—3-十二酮；5—4-十三酮；6—5-十四酮；7—6-十五酮；8—6-十六酮

色谱柱：Tanax（60 目～80 目）；0.61m×2mm

柱　温：150 ℃→300 ℃，5 ℃·min^{-1}

载　气：N_2，15ml·min^{-1}

检测器：FID

图 22-99　C_{10}～C_{16}脂肪酮

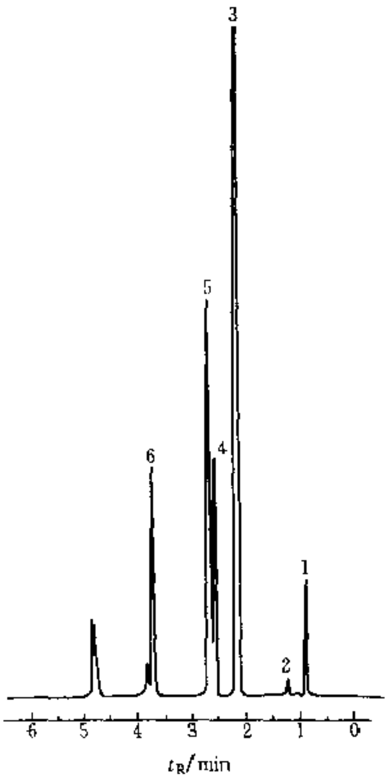


图 22-100　吡呐酮[79]

色谱峰：1—丙酮；2—异丙醇；3—吡呐酮；4—4-甲基-2-戊酮；5—吡呐基醇；6—异亚丙基丙酮

色谱柱：OV-101，27m×0.25mm

柱　温：60 ℃

载　气：N_2

检测器：FID

气化室温度：150 ℃

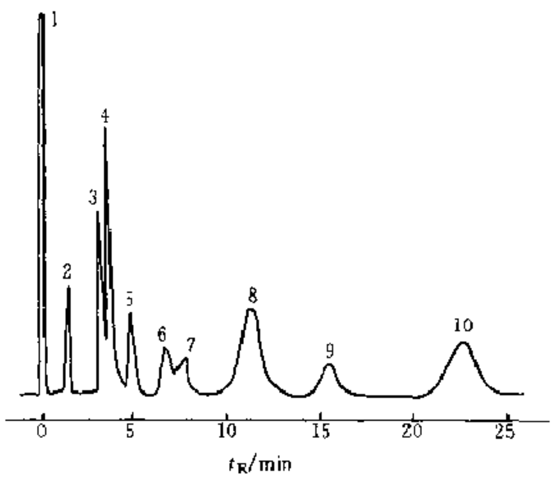


图 22-101　部分酮与醛[40]

色谱峰：1—空气；2—乙醛；3—丙醛；4—丙酮；5—异丁醛；6—正丁醛；7—甲乙酮；8—异戊醛＋甲基异丙基酮；9—甲基正丙基酮；10—甲基异丁基酮

色谱柱：苯二甲酸二辛酯

柱　温：80 ℃

载　气：H_2，75ml·min^{-1}

检测器：TCD

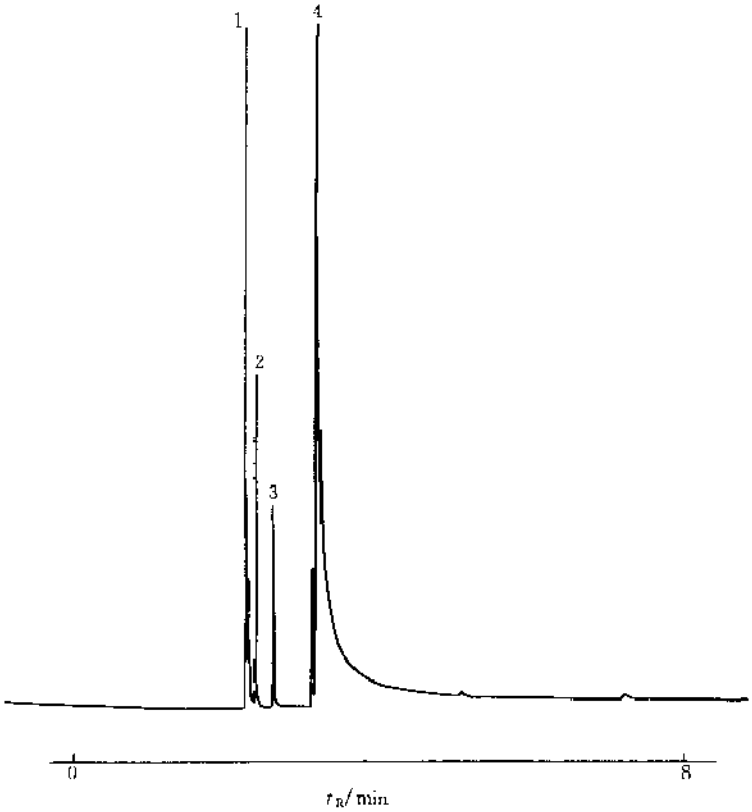


图 22-102 福尔马林[61]

色谱峰：1—空气；2—甲醛；3—甲醇；4—水
色谱柱：Carbowax 20M，30m×0.25mm
柱 温：70℃
载 气：He
检测器：HID

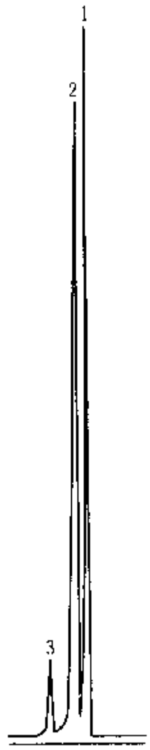
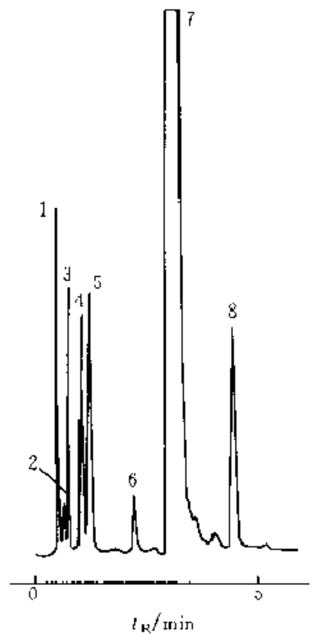


图 22-103 工业甲醛[62]

色谱峰：1—甲醛；2—水；3—甲醇
色谱柱：GDX-403(60目~80目)，2m×3mm
柱 温：120℃
载 气：H_2，60ml·min^{-1}
检测器：TCD
气化室温度：200℃
检测器温度：180℃



色谱峰：1—乙醛；2—乙醇；3—丙醛；4—异丁醛；5—正丁醛；6—乙醛缩二乙醇；7—全氯乙烯；8—苯甲醛

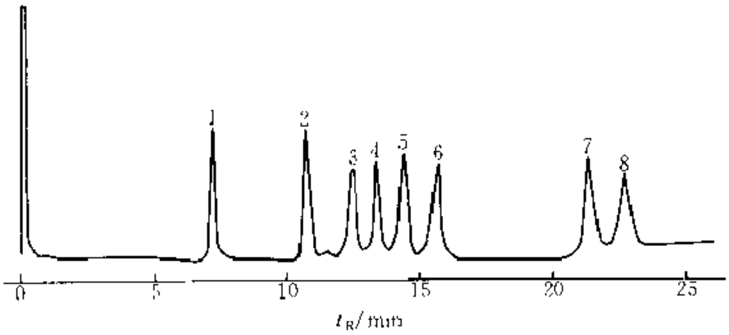
色谱柱：CP-Sil 5 CB，10m×0.53mm，d_f=5.0μm

柱 温：50℃→200℃，10℃·min^{-1}

载 气：N_2，10ml·min^{-1}

检测器：FID

图 22-104 脂肪醛[63]



色谱峰：1—蒽；2—甲醛；3—乙醛；4—丙醛；5—正丁醛；6—正戊醛；7—苯醛；8—对甲苯醛

色谱柱：4% OV-17，Chromosorb G AW-HMDS（80 目～100 目），1.22m×6mm

柱　温：150 ℃→300 ℃，7.5 ℃·min^{-1}

载　气：He，60ml·min^{-1}

检测器：FID

检测器温度：300 ℃

图 22-105　醛类（2,4-二硝基苯腙衍生物）[84]



图 22-106　工业乙醚[85]

色谱峰：1—空气；2—乙烯；3—水；4—甲醇；5—乙醛；6—乙醇；7—未知物；8—丙酮；9—乙醚

色谱柱：上海试剂厂 408 有机担体（60 目～80 目），3m×3mm

柱　温：110 ℃　　检测器：TCD

载　气：H_2，25ml·min^{-1}　　气化室温度：250 ℃

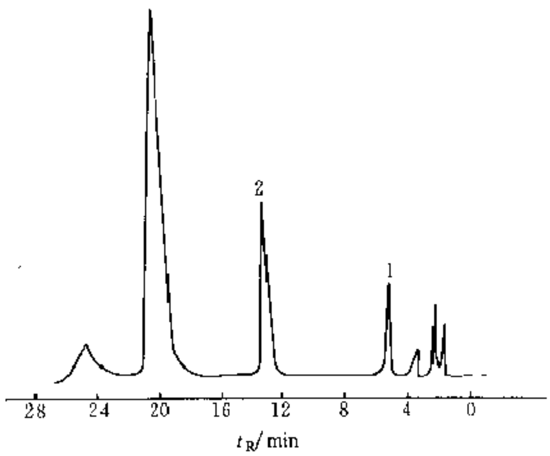


图 22-107　异戊醚

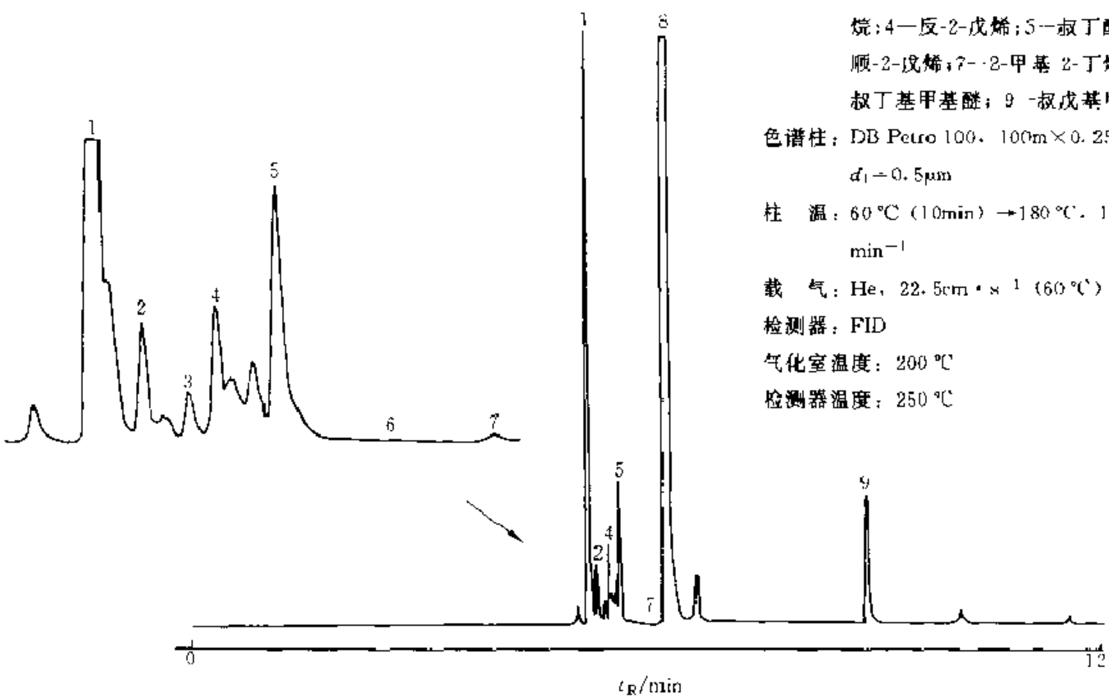
色谱峰：1—异戊醇；2—2 异戊醚

色谱柱：8% Apiezon M，101 担体（40 目～60 目），6m×4mm

柱　温：120 ℃　　气化室温度：185 ℃

载　气：N_2　　检测器温度：120 ℃

检测器：FID



色谱峰：1—异戊烷；2—1-戊烯；3—正戊烷；4—反-2-戊烯；5—叔丁醇；6—顺-2-戊烯；7—2-甲基-2-丁烯；8—叔丁基甲基醚；9—叔戊基甲基醚

色谱柱：DB Petro 100，100m×0.25mm，d_f=0.5μm

柱　温：60℃（10min）→180℃，10℃·min^{-1}

载　气：He，22.5cm·s^{-1}（60℃）

检测器：FID

气化室温度：200℃

检测器温度：250℃

图 22-108　粗叔丁基甲基醚[73]

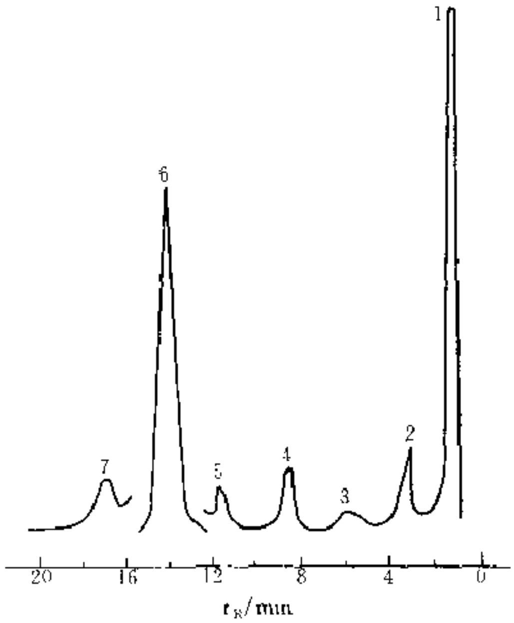


图 22-109　对氨基苯甲醚[99]

色谱峰：1—溶剂；2—苯胺；3—未知物；4—邻氨基苯甲醚；5—对氯苯胺；6—对氨基苯甲醚；7—间氨基苯甲醚

色谱柱：5% 聚乙二醇丁二酸酯，上海试剂厂101担体（60目～80目），2m×3.5mm

柱　温：140℃　　气化室温度：300℃

载　气：N_2　　检测器温度：220℃

检测器：FID

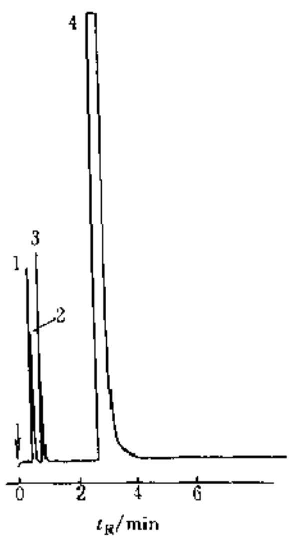


图 22-110　过氯乙烯中醚类[84]

色谱峰：1—氧化丙烯；2—甲醛缩二甲醇；3—氧化丁烯；4—过氯乙烯

色谱柱：CP Sil 5 CB，10m×0.53mm，d_f=5.0μm

柱　温：50℃→250℃，15℃·min^{-1}

载　气：N_2，10ml·min^{-1}

检测器：FID

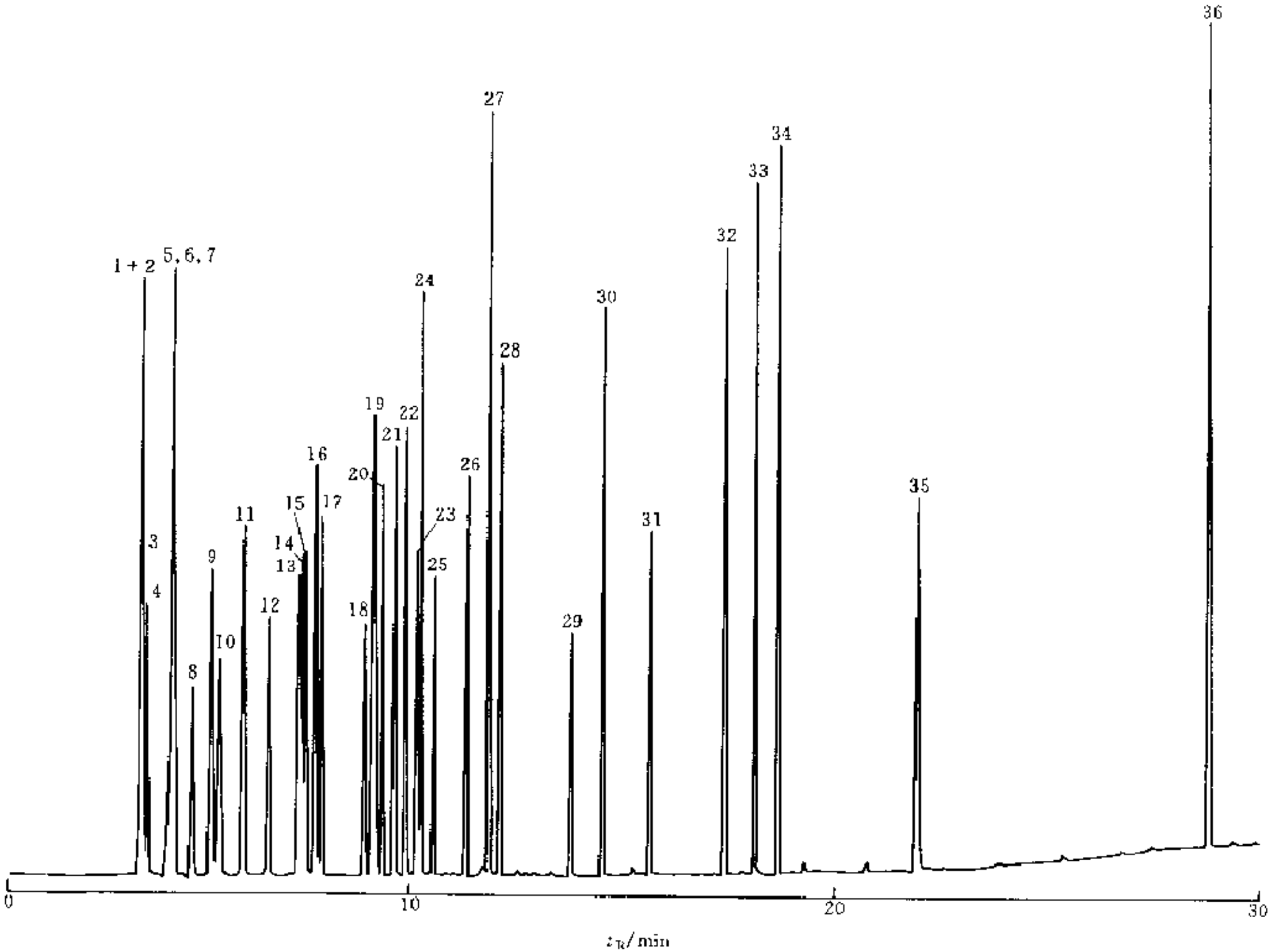


图 22-111 醚类[51]

色谱峰：1—乙基乙烯基醚；2—呋喃；3—乙醚；4—丙烯醛；5—乙腈；6—二氯甲烷；7—二硫化碳；8—丙烯腈；9—甲基叔丁基醚；10—正己烷；11—四氢呋喃；12—丙腈；13—甲基丁基醚；14—1,3-二噁茂烷；15—异丁烯腈；16—乙基烯丙基醚；17—甲基叔戊基醚；18—丙基醚；19—Glyme；20—乙基丁基醚；21—异辛烷；22—烯丙基醚；23—四氢吡喃；24—Diglyme；25—1,4-二噁烷；26—表氯乙醇；27—吡啶；28—嘧啶；29—二甲基呋喃；30—丁基醚；31—二甲基砜；32—Pyradazine；33—苯胺；34—戊基醚；35—Triglyme；36—苄基醚

色谱柱：DB-624，30m×0.32mm，d_f=1.8μm

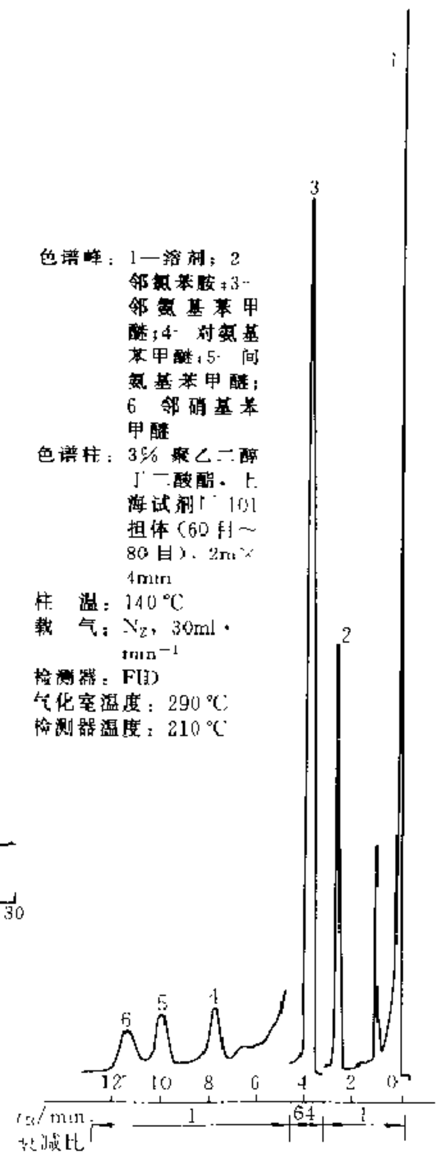
柱 温：35℃(5min)→260℃(10min)，10℃·min^{-1}

载 气：He，35cm·s^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：300℃



色谱峰：1—溶剂；2—邻氨苯胺；3—邻氨基苯甲醚；4—对氨基苯甲醚；5—间氨基苯甲醚；6—邻硝基苯甲醚

色谱柱：3% 聚乙二醇丁二酸酯，上海试剂厂101担体(60目～80目)，2m×4mm

柱 温：140℃

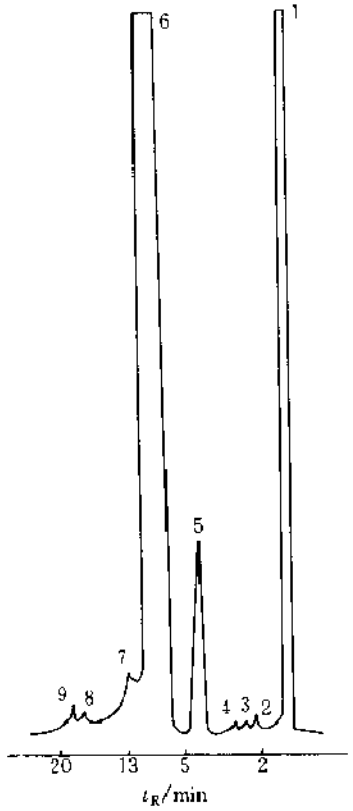
载 气：N_2，30ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：290℃

检测器温度：210℃

图 22-112 邻氨基苯甲醚



色谱峰：1—三氯甲烷；2—苯酚；3—邻甲酚；5—内标；6—二苯醚；4、7—未知物；8、9—氯代二苯醚

色谱柱：SE-30∶PEG 20M∶101 硅烷化担体（80 目～100 目）=5.7∶0.25∶100（m/m），3m×2mm

柱　温：160 ℃

载　气：N_2

检测器：FID

气化室温度：300 ℃

检测器温度：180 ℃

图 22-113　二苯醚[91]

第四节　含氧混合物色谱图

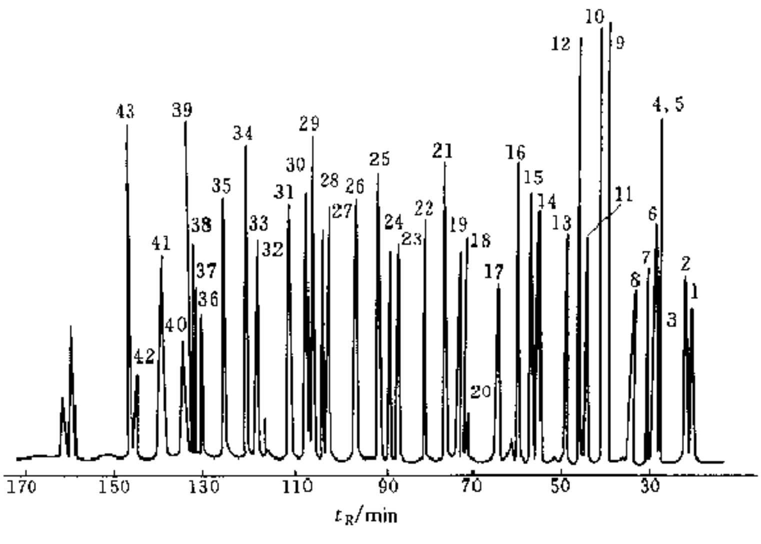


图 22-114　醛与酮[93]

色谱峰：1—丙醛；2—戊烷；3—二甲硫醚；4—丁二酮；5—丁醛；6—2-丁酮；7—正己烷；8—2-丁烯醛；9—2-戊酮；10—戊醛；11—正庚烷；12—丁酸甲酯；13—2-戊烯醛；14—2-己酮；15—己醛；16—正辛烷；17—2-己烯醛；18—2-庚酮；19—庚醛；20—2,4-己二烯醛；21—正壬烷；22—2-庚烯醛；23—2-辛酮；24—辛醛+2,4-庚二烯醛；25—正癸烷；26—2-辛烯醛；27—2-壬酮；28—壬醛+2,4-辛二烯醛；29—正十一烷；30—辛酸甲酯；31—2-壬烯醛；32—癸醛；33—2,4-壬二烯醛；34—正十二烷；35—2-癸醛；36—2-十一烷酮；37—十一醛；38—2,4-癸二烯醛；39—正十三烷；40—辛酸甲酯；41—2-十二烯醛；42—十二烷醛；43—正十四烷

色谱柱：SE-30，78m×0.9mm

柱　温：30 ℃→170 ℃

载　气：N_2

检测器：FID

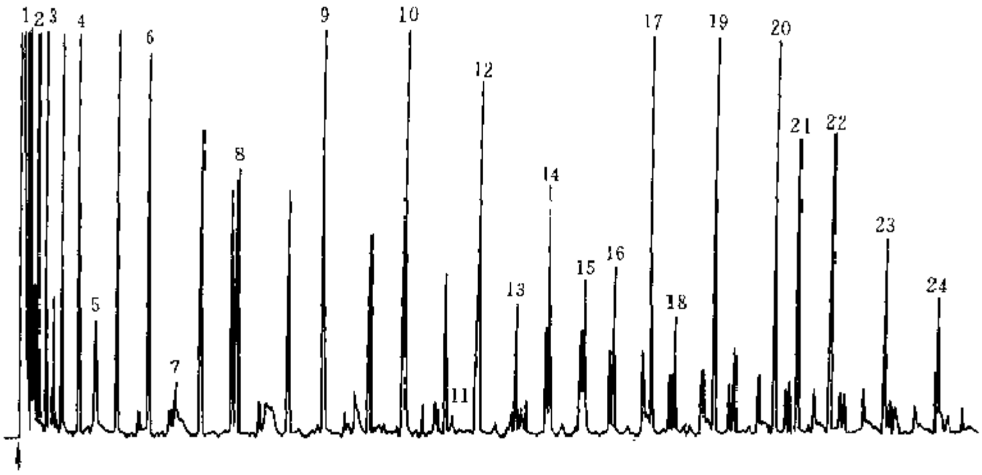


图 22-115　含氧化合物（一）[93]

色谱峰：1—乙醛＋丙醛；2—丁醛；3—甲醇；4—乙醇；5—戊醛；6—丙醇；7—己醛；8—丁醇；9—戊醇；10—己醇；11—乙酸；12—庚醇；13—丙酸；14—辛醇；15—丁酸；16—壬醇；17—戊酸；18—癸醇；19—己酸；20—庚酸；21—联苯；22—辛酸；23—壬酸；24—癸酸

色谱柱：AT-100，50m×0.25mm

柱　温：40℃(5min)→80℃(1min)，5℃·min⁻¹→210℃，5℃·min⁻¹

载　气：He，1.0ml·min⁻¹

检测器：FID

气化室温度：240℃

检测器温度：240℃

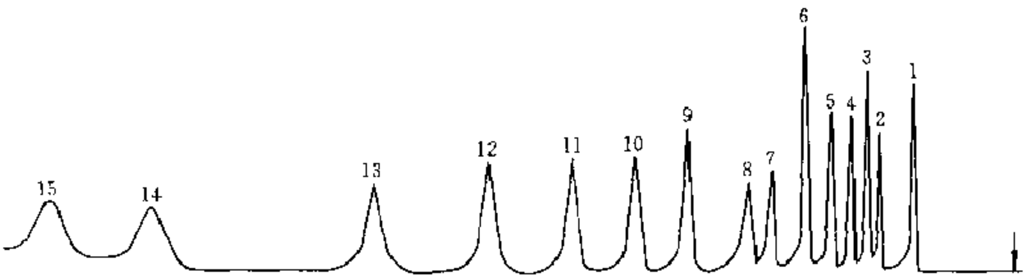


图 22-116　含氧化合物（二）[94]

色谱峰：1—乙醛；2—甲酸甲酯；3—乙醚；4—乙烯基乙醚；5—甲缩醛；6—丙酮；7—乙酸甲酯；8—甲醇；9—二甲基乙缩醛；10—乙醇；11—甲乙酮；12—丙酮二甲基乙缩醛；13—对称二甲氧基乙烷；14—2,2-二甲基-1,3-二噁茂烷；15—二乙基酮

色谱柱：二-2-乙基己基癸二酸酯＋Ucon LB 550X＋角鲨烷＋Carbowax 1540 质量比为 25∶10∶35∶30，Celite，4m×2.7mm

柱　温：55℃

载　气：N_2，9.5ml·min⁻¹

检测器：FID

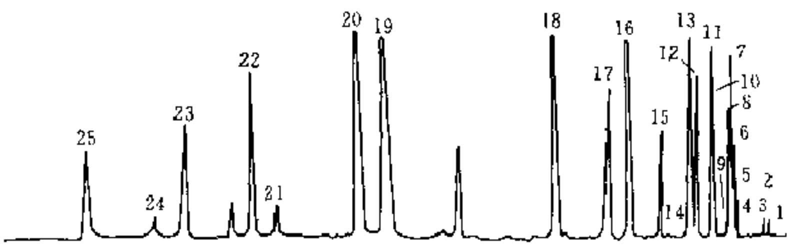


图 22-117　含氧化合物（三）[88]

色谱峰：1—甲酸甲酯；2—未知物；3—甲酸乙酯＋2-甲基丙醛；4—乙酸乙酯＋1-丁醛＋1-甲醇；5—丁酮；6—丙酸乙酯；7—乙酸丙酯；8—1-戊醛；9—2-丁醇；10—丙醇；11—丁酸乙酯；12—2-甲基-1-丙醇＋乙酸丁酯；13—甲基丁基酮；14—甲酸正戊酯；15—1-丁醇；16—乙酸正戊酯；17—3-甲基-1-丁醇；18—1-戊醇；19—庚酸乙酯；20—1-己醇；21—辛酸乙酯；22—糠醛；23—1-辛醇；24—壬酸乙酯；25—1-壬醇

色谱柱：Carbowax 20M，77m×0.28mm

柱　温：86℃

载　气：H_2，$\bar{u}$=35cm·s⁻¹

检测器：FID

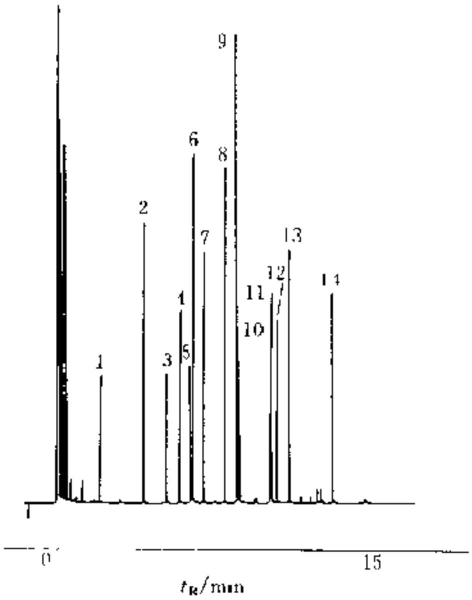


图 22-118　含氧化合物（四）

色谱峰：1—乙偶烟乙酯；2—（—）芹烯；3—甲基庚基酮；4—甲基苄基酮；5—3-苯基丙醇；6—苯甲酸乙酯；7—辛酸乙酯；8—2-苯基乙基乙酸酯；9—对丙烯基茴香醚；10—壬酸乙酯；11—己酸乙酯；12—甲基丁了香酚；13—乙酸肉桂酯；14—苯甲酸己酯

色谱柱：SE-54，25m×0.32mm

柱　温：50℃～200℃，10℃·min^{-1}

载　气：He，70kPa

检测器：FID

气化室温度：235℃

检测器温度：250℃

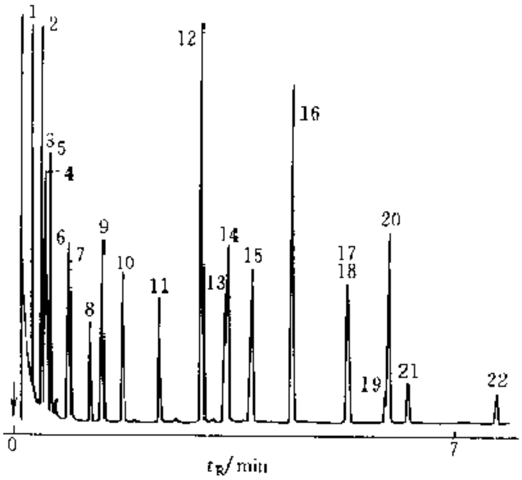


图 22-119　脂肪酸甲酯[21]

色谱峰：1—乳酸甲酯；2—丙二醇；3—丁二醇；4—β羟基丁酸甲酯；5—丙二酸甲酯；6—丙酮酸乙肟；7—丁二酸甲酯；8—苯甲酸甲酯；9—戊二酸甲酯；10—己二酸甲酯；11—2-羟基苯乙酸甲酯；12—4-苯基丁酸甲酯；13—α-氧代戊二酸乙肟；14—α-氧代己二酸乙肟；15—4-羟基苯乙酸甲酯；16—十碳二羧酸甲酯；17—羟基戊酸甲酯；18—马尿酸甲酯；19—4-羟基扁桃酸甲酯；20—吲哚基乙酸甲酯；21—2-羟基马尿酸甲酯；22—5-羟基马尿酸甲酯

色谱柱：CP—Sil 19 CB，10m×0.53mm

柱　温：80℃→280℃，25℃·min^{-1}

载　气：H_2，40kPa

检测器：FID

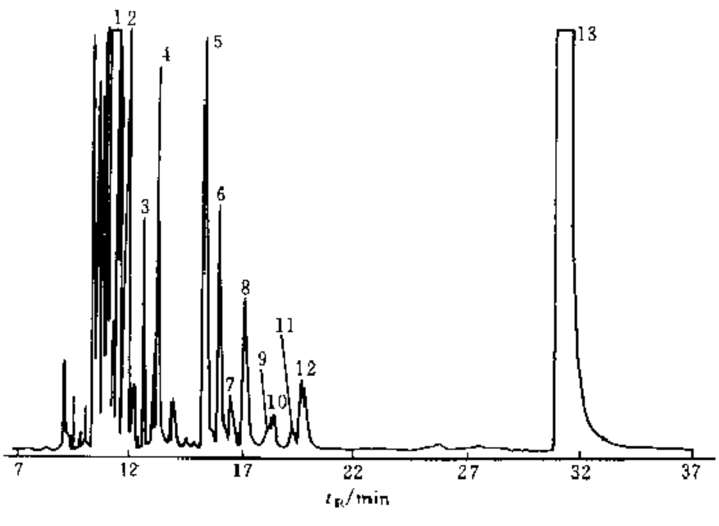


图 22-120　C_4～C_5 环氧化合物[22]

色谱峰：1—2-甲基-1,2-环氧丙烷；2—反-2,3-环氧丁烷；3—顺-2,3-环氧丁烷；4—1,2环氧丁烷；5—1,2-环氧戊烷；6—反-2,3-环氧戊烷；7—顺-2,3-环氧戊烷；8—未知物；9—3-甲基-1,2-环氧丁烷；10—2-甲基-1,2-环氧丁烷；11—2-甲基-2,3-环氧丁烷；12—未知物；13—溶剂

色谱柱：OV 101，100m×0.27mm，d_f= 0.9μm

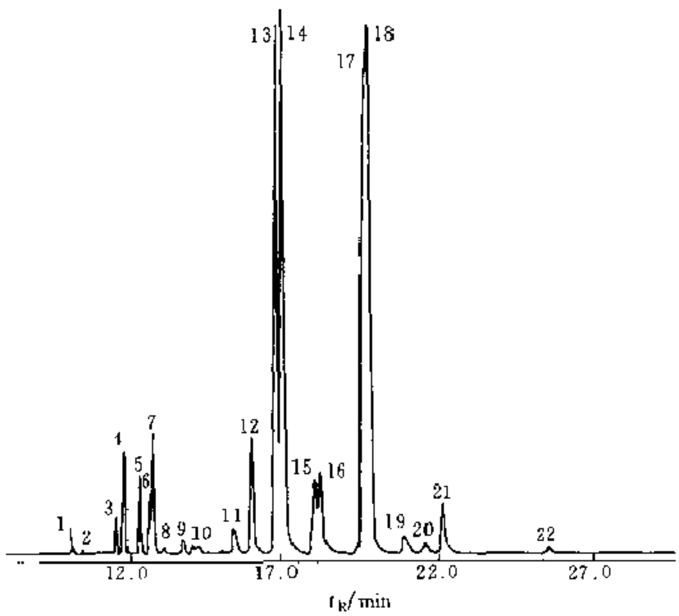
柱　温：70℃

载　气：N_2，0.6ml·mun^{-1}

检测器：FID

气化室温度：200℃

检测器温度：220℃



色谱峰：3～8—己烯；12—2,3-二甲基-2,3-环氧丁烷；13—4-甲基-2,3-环氧戊烷；14—2甲基-2,3-环氧戊烷；15—4-甲基-2,3-环氧戊烷；16—2,3-二甲基-1,2-环氧丁烷；17—2-甲基-1,2-环氧戊烷+反3,4环氧己烷；18—反2,3-环氧己烷；19—4-甲基环氧戊烷；20—顺-3,4-环氧己烷；21—顺-2,3环氧己烷；1、2、9～11，22—未定

色谱柱：OV—101，100m×0.27mm，d_f—0.9μm

柱　温：90℃

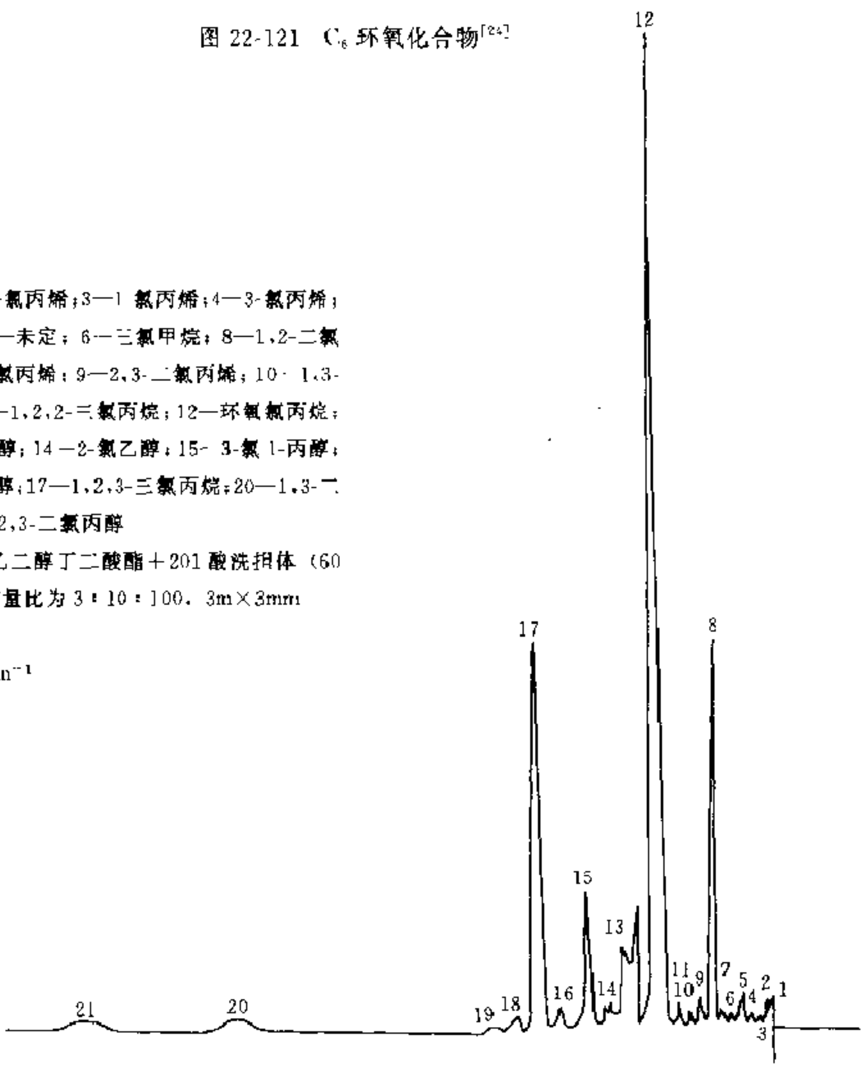
载　气：N_2，0.6ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：200℃

检测器温度：220℃

图 22-121　C_6环氧化合物[24]



色谱峰：1—空气；2—2-氯丙烯；3—1氯丙烯；4—3-氯丙烯；5、7、18、19—未定；6—三氯甲烷；8—1,2-二氯丙烷+1,2-二氯丙烯；9—2,3-二氯丙烯；10—1,3-二氯丙烯；11—1,2,2-三氯丙烷；12—环氧氯丙烷；13—1-氯2-丙醇；14—2-氯乙醇；15—3-氯1-丙醇；16—3-氯丙烯醇；17—1,2,3-三氯丙烷；20—1,3-二氯丙醇；21—2,3-二氯丙醇

色谱柱：硅油275+聚乙二醇丁二酸酯+201酸洗担体（60目～80目）质量比为3∶10∶100，3m×3mm

柱　温：140℃

载　气：H_2，75ml·min^{-1}

检测器：TCD

气化室温度：250℃

检测器温度：180℃

图 22-122　工业环氧氯丙烷[15]



图 22-123 含氧化合物与烷烃（一）[6]

色谱峰：1—甲烷；2—乙烷；3—丙烷；4—甲醇；
5—乙醛
色谱柱：PoraPLOTQ，25m×0.32mm
柱 温：100℃
载 气：H_2
检测器：FID

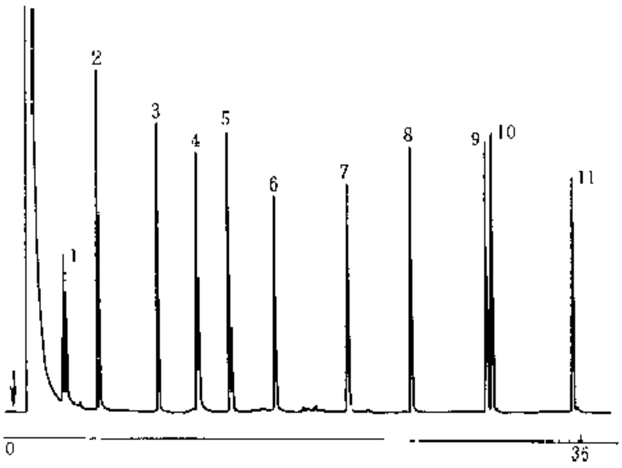


图 22-124 含氧化合物与烷烃（二）[61]

色谱峰：1—丁二醇；2—癸烷；3—十一烷；4—1-辛醇；5—壬醇；6—2,6-二甲基苯酚；7—2,6-二甲基苯胺；8—癸酸甲酯；9—二环己胺；10—十一酸甲酯；11—十二酸甲酯

色谱柱：CP-Sil 20 CB，25m×0.22mm，d_f＝0.2μm

柱 温：40℃→200℃，2℃·min^{-1}

载 气：H_2，80kPa

检测器：FID

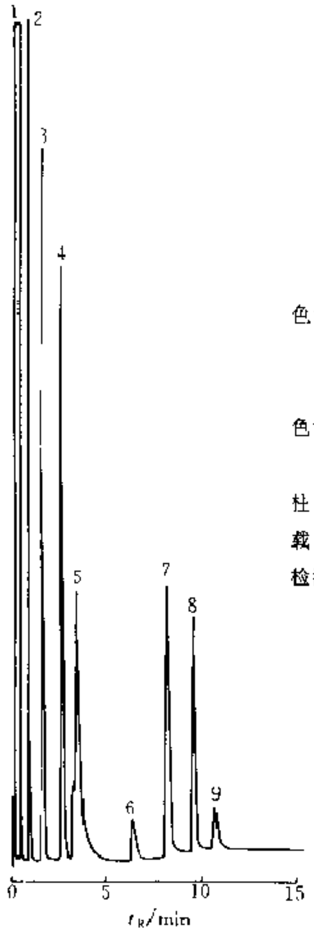


图 22-125 含氧化合物和烷烃（二）[61]

色谱峰：1—正壬烷；2—正癸烷；3—正十一烷；4—正十二烷；5—正壬酮；6—2,6-二甲基苯胺；7—正辛醇；8—萘；9—2,6-二甲基苯酚

色谱柱：5%1-甲基-3-乙基咪唑啉氯，Chromosorb P（100目～120目），2m×2mm

柱 温：70℃→160℃，10℃·min^{-1}

载 气：N_2，30ml·min^{-1}

检测器：FID

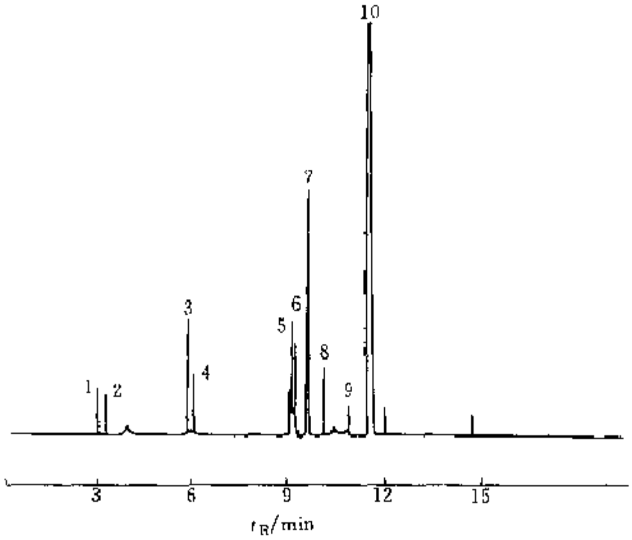


图 22-126　五碳烃馏分羰化产物[66]

色谱峰：1—2-甲基丁烷；2—戊烷；3—苯；4—正丁醇；5—2-甲基-1-戊醇；6—3-甲基-1-戊醇；7—1-己醇；8—未定；9—1-庚醇；10—2-乙基乙醇

色谱柱：SE-54，30m×0.25mm

柱　温：30℃（4min）→200℃，18℃·min^{-1}

载　气：线速 16.7cm·s^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：250℃

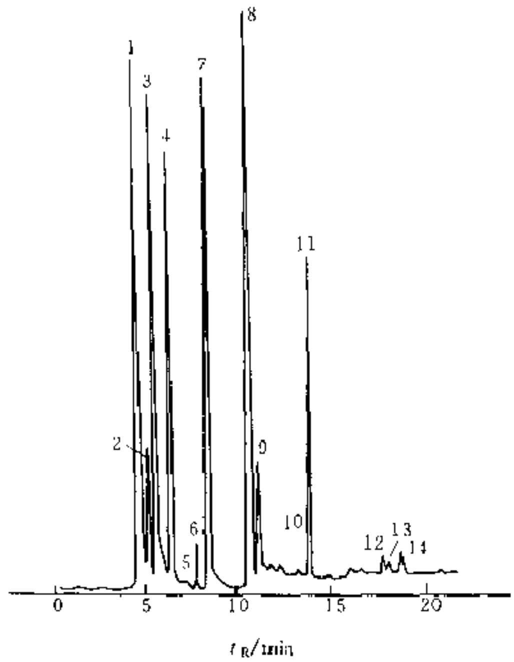


图 22-127　乙酸乙烯酯氢甲酰化反应生成物[68]

色谱峰：1—甲醇；2—丙醛；3—乙酸甲酯；4—1,1-二甲氧基乙烷；5—乙酸酐；6—β-羟基丙醛；7—1,1-二甲氧基丙烷；8—2-乙酰氧基丙醛；9—3-乙酰氧基丙醛；10—乙酰氧基丙酮；11—1,1,2-三甲氧基丙烷；12—二甲氧基乙酸甲酯；13—3-甲氧基丁醇；14—1-甲氧基-2-甲基-2-丙醇

色谱柱：SE-52（SCOT 柱），40m×0.25mm

柱　温：30℃（4min）→180℃（5min），7℃·min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FID

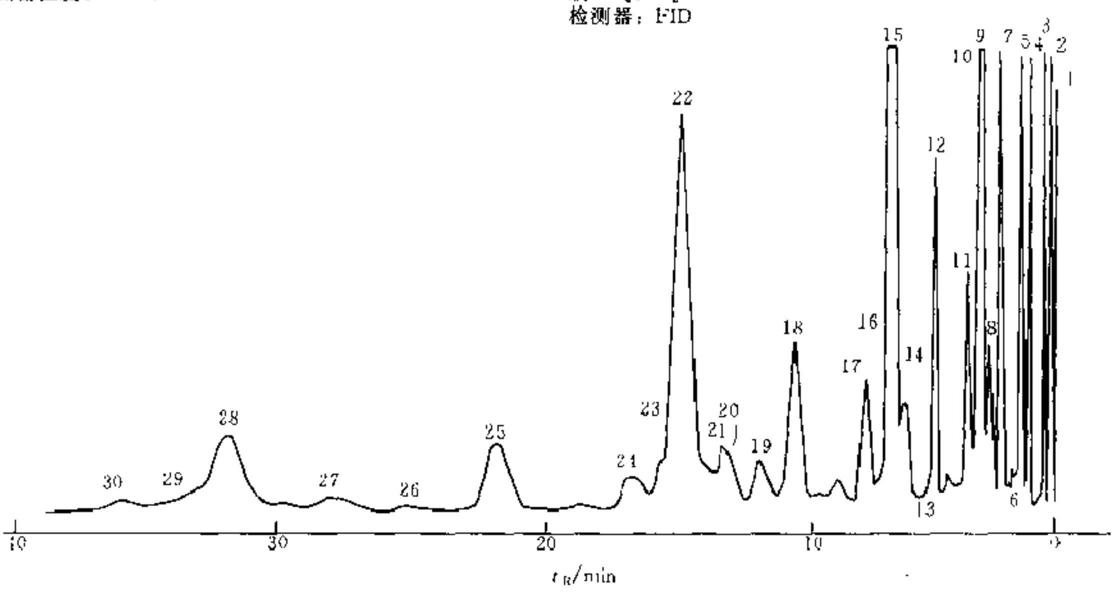


图 22-128　石蜡氧化尾气[70]

色谱峰：1—甲烷；2—乙烷；3—丙烷；4—丁烷；5—乙醛；6—甲醇；7—戊烷；8—乙醇；9—丙醛；10—丙酮；11—乙酸甲酯；12—己烷；13—异丁醛；14—丙醇；15—丁醛；16—乙酸乙酯；17—丙酸甲酯；18—庚烷；19—异戊醛；20—乙酸；21—丁醇；22—戊醛；23—丁酸甲酯；24—戊酮；25—辛烷；26—异己醛；27—丙酸；28—己醛；29—戊酸甲酯；30—己酮

色谱柱：氧化改质的 GDX 102，4m×2mm

柱　温：150℃

载　气：N_2，15ml·min^{-1}

检测器：FID

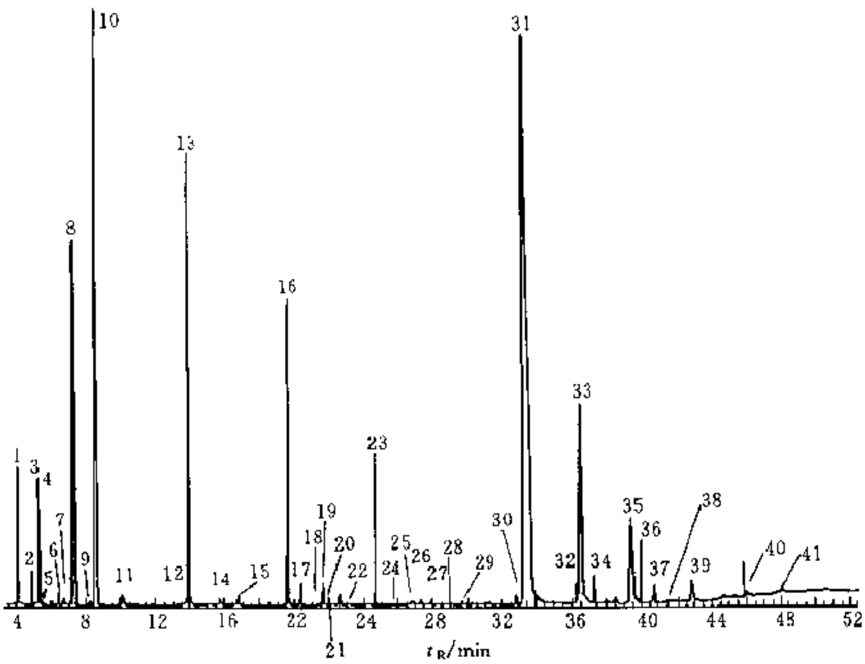


图 22-129 水煤气加氢水相产品[76]

色谱峰：1—乙醛；2—丙醛；3—2-丙酮；4—乙酸甲酯；5—1-乙氧基-1-甲氧基乙烷；6—丁醛；7—乙酸乙酯；8—甲醇+2-丁酮；9—2-丙醇；10—乙醇；11—2-戊酮；12—2-丁醇；13—1-丙醇；14—2-己酮；15—2-甲基-1-丙醇；16—1-丁醇；17—乙酸戊酯；18—2-庚酮；19—环戊酮；20—2-甲基环戊酮；21—3-甲基-1-丁醇；22—3-甲基环戊酮；23—1-戊醇；24—2-辛酮；25—环己酮；26—4-甲基-1-戊醇；27—环戊醇；28—1-己醇；29—乙酸庚酯；30—1-庚醇；31—乙酸；32—1-辛醇；33—丙酸；34—2-甲基丙酸；35—丁酸；36—二氢-2（3H）-呋喃酮；37—1-壬醇；38—2-甲基丁酸；39—戊酸；40—己酸；41—庚酸

色谱柱：SP 1000，60m×0.25mm，d_f=0.25μm　　检测器：FID

柱　温：50℃（10min）→200℃（5min），4℃·min^{-1}　　气化室温度：200℃

载　气：He，$\bar{u}$=30cm·s^{-1}　　检测器温度：250℃

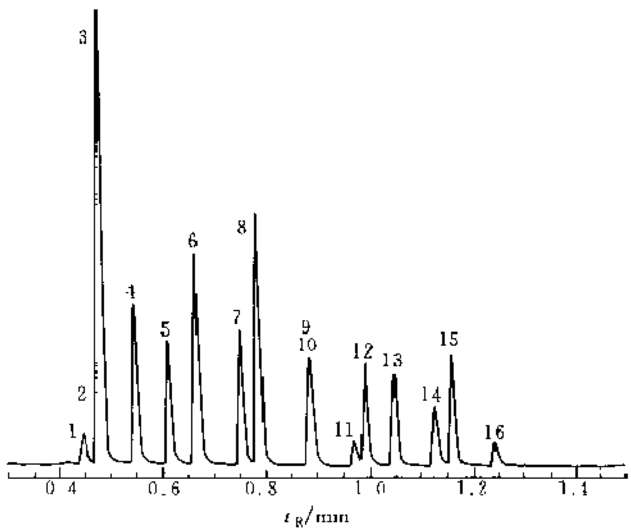


图 22-130 汽油中含氧化合物[86]

色谱峰：1—空气；2—水；3—甲醇；4—乙醇；5—异丙醇；6—叔丁醇；7—正丙醇；8—甲基叔丁基醚；9—仲丁醇；10—二异丙基醚；11—乙基叔丁基醚；12—异丁醇；13—叔戊醇；14—乙烯基乙二醇二甲基醚；15—正丁醇；16—叔戊基甲基醚

色谱柱：HP-5，10m×0.1mm，d_f=0.35μm　　检测器：原子发射检测器

柱　温：40℃→200℃，20℃·min^{-1}　　气化室温度：250℃

载　气：He，0.15ml·min^{-1}

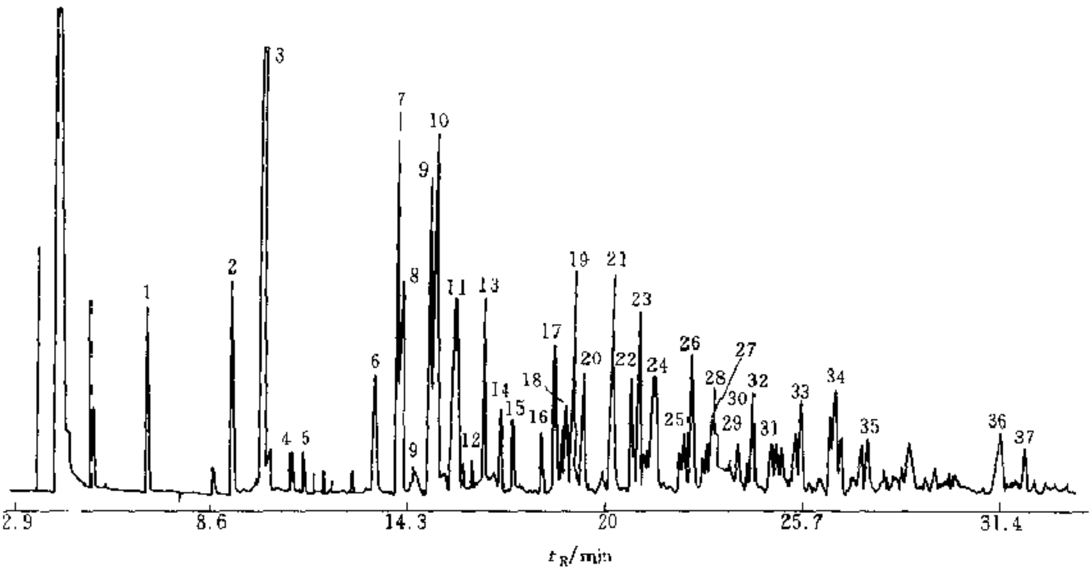


图 22-131　220 ℃前页岩油中含氧化合物[87]

色谱峰：1—苯酚；2—邻甲酚；3—间甲酚；4—2-壬酮；5—2,4-二甲酚；6—邻乙基苯酚；7—2,5-二甲酚；8—2,3-二甲酚；9—2,6-二甲酚；9′—间乙基苯酚；10—对乙基酚；11—3,4-二甲酚；12—邻异丙基酚；13—3,5-二甲酚；14—2-癸酮；15—2,4,6-三甲酚；16—2-正丙基酚；17—4-乙基-3-甲基酚；18—2-乙基-5-甲基酚；19—3-乙基-5-甲基酚；20—2-乙基-6-甲基酚；21—间丙基酚；22—2,4,5-三甲酚；23—2,3,5-三甲酚；24—十二烷腈；25—对叔丁基酚；26—2-十二烷酮；27—5-甲基-2-异丙基酚；28—邻丁基酚；29—对丁基酚；30—邻顺丁基酚；31—对顺丁基酚；32—5-氨基茚；33—α,α-二乙基酚；34—十三烷腈；35—2-十二烷酮；36—十四烷腈；37—2-十三烷酮

色谱柱：OV-1，50m×0.32mm，d_f=0.52μm

柱　温：70 ℃→200 ℃，3 ℃・min^{-1}

载　气：H_2

检测器：FID

气化室温度：298 ℃

参　考　文　献

1　GB 538—85

2　王清龙．第二次全国石油化工色谱学术报告会文集，1986：167

3　Chrompack News，1985；12（3）：7

4　Henrich L H．J Chrom Sci，1988；26：198

5　于爱民，杨文军，金钦汉等．分析化学，1993；21：1337

6　Bruner F，Lattanzi L，Mangani F，et al．Chromatographia，1994；38：104

7　Langvardt P W，Ramstad T．J Chrom Sci，1981；19：536

8　Supelco．Chromatography Supplies Catalog 30，1992：116

9　SGE．Analytical Products 1993/1994 Catalogue，1994：71～76

10　苏天升．分析化学，1982；10：210

11　GB 7814—87．中国国家标准汇编，1991；92：472

12　J&W Scientific．1994-1995 Chromatography Catalog & Reference Guide，1995：210

13　罗春荣，林炳承，李浩春等．色谱，1986；4：171

14　林秀英，类文革．色谱，1985；2：175

15　岛津．Gas Chromatography Data Sheet，CA180～920

16　Valdez D．J Chrom Sci，1985；23：128

17 Chrompack News, 1985; 12 (5): 7
18 Simek P, Heydova A, Jegorov A. HRC, 1994; 17: 145
19 Chrompack News, 1985; 12 (4): 9
20 Boneva S. Chromatographia, 1991; 31: 171
21 Chrompack News, 1985; 12 (5): 6
22 Boneva S, Dimov N. Chromatographia, 1987; 23: 770
23 Berezkin V G. HRC, 1994; 17: 280
24 Boneva S, Dimov N. Chromatographia, 1987; 23: 271
25 GB 2601—81. 中国国家标准汇编. 1986; 17: 310
26 GB 2604—81. 中国国家标准汇编, 1986; 17: 321
27 Alltech. Chromatography Catalog 350, 1995: 40~44
28 Weber L. J Chromatogr, 1992; 574: 349
29 Ono A. Chromatographia, 1980; 13: 574
30 Chanhan J, Darbre A. HRC&CC, 1981; 4: 11
31 Brady R F. Jr, Pettitt B C. J Chromatogr, 1974; 93: 375
32 Supelco Catalog 18: 27
33 沈椿芳, 邵令娴, 李镇国. 色谱, 1985; 3: 274
34 傅若农, 葛继龙, 邓景辉等. 分析化学, 1993; 21: 380
35 White C M, Li N C. Anal Chem, 1982; 54: 1564
36 Clifford D R, Watkins D A M. J Gas Chem, 1968; 6: 191
37 中国科学院化学研究所色谱组. 分析化学, 1973; 1 (3): 54
38 岛津. Gas Chromatograph Data Sheet, CA 180-921
39 Chrompack Application Note Application, 184-GC
40 袁愈明, 贺德华. 分析化学, 1984; 12: 536
41 Chrompack News, 1985; 12 (4): 8
42 Korhonen I O O. Chromatographia, 1983; 17: 70
43 郑文晖, 谭炳炎, 汤丽芬等. 色谱, 1996; 14: 53
44 胡兹苓, 色谱, 1993; 11: 197
45 GB 13097—91. 中国国家标准汇编, 1993; 165: 1
46 ZB G17010 87
47 Husek P. J Chromatogratogr B, 1995; 669: 352
48 Kaufman M L, Fridman S, Wender I. Anal Chem, 1967; 39: 1011
49 Alltech. Chromatography Catalog 350, 1995: 45
50 GB/T 12717—91. 中国国家标准汇编, 1993; 159: 204
51 J & W Scientific. 1994-1995 Chromatography Catalog & Reference Guide, 1995: 170~220
52 杨寅章, 杨在生, 刘淑军. 色谱, 1993; 11: 247
53 大庆石油化工总厂化验室. 分析化学, 1976; 4: 40
54 ZB G17012 87
55 ZB G17008 −87
56 ZB G17011 87
57 ZB G17009—87
58 姜开荣, 李明杨, 陆伯钧等. 第九次全国色谱学术报告会文集, 1993: 414
59 Smith I D, Water D G. HRC, 1992; 15: 696
60 Horka M, Kahle V, Janak K, et al. HRC&CC, 1985; 8: 259
61 Chrompack News, 1985; 12 (3): 9
62 Hewlett Packard. Application Note, AN228 14
63 SGE Analytical Products 1993/1994 Catalogue, 1994: 47

64 Supelco. Chromatography Products, 1994; 1994: 697～700

65 Poole C F, Butler H T, Codden M E, et al. J Chromatogr, 1984; 289: 299

66 何嘉，董运宇. 第九次全国色谱学术报告会文集, 1995: 383

67 Husek P. J Chromatogr, 1993; 615: 334

68 黄撷云，杨世琰，何春燕. 色谱, 1996; 14: 1

69 Gee M. Anal Chem, 1965; 37: 926

70 刘俊杰，王凤莲，金倩风. 第四次全国色谱学术报告会文集, 1983: 169

71 Антонишина В Н, Гуменецкий В В, Тупицкий О Н, И Др. Нефтехимия, 1974; 14: 638

72 Supelco. Chromatography Catalog 26: 2

73 GB 6026—89. 中国国家标准汇编, 1990; 66: 394

74 Navak J, Janak J. Anal Chem, 1966; 38: 265

75 J Chrom Sci, 1990; 28: 89

76 Anderson R R, White C M. HRC, 1994; 17: 245

77 Malik A, Berezkin V G, Gavrichev V S. Chromatographia, 1984; 19: 327

78 陈俊仲，胡振元. 全国第二届毛细管色谱报告会文集, 1984: 98

79 郑书珍. 色谱, 1985; 2: 153

80 西 末雄. 分析化学（日）, 1962; 11: 415

81 Andrawes F F. J Chromatogr, 1984; 290: 65

82 叶福祥. 第十次全国色谱学术报告会文集, 1995: 102

83 Chrompack News. 1985; 12 (1): 8

84 Papa L J, Tuner L P. J Chrom Sci, 1972; 10: 744

85 HG 2-1437—81

86 Quimby B D, Giarrocco V, Sullivan J J, et al. HRC, 1992; 15: 705

87 王加宁，田玉增，关亚风等. 色谱, 1992; 10: 339

88 李浩春. 食品与发酵工业, 1977; (1): 35

89 GB 10659—89. 中国国家标准汇编, 1993; 131: 505

90 GB 7370—92

91 ZB G17005—87

92 Levy J M, Wolfram L E, Yancey J A. J Chromatogr, 1983; 279: 133

93 Badings H T, van der Pol J J G, Wassink J G. Chromatographia, 1975; 8: 440

94 Molera M J, Domingues J A G, Biarge J F. J Chrom Sci, 1969; 7: 305

（李浩春　李全洪）

第二十三章　含氮化合物色谱图

第一节　硝基化合物色谱图

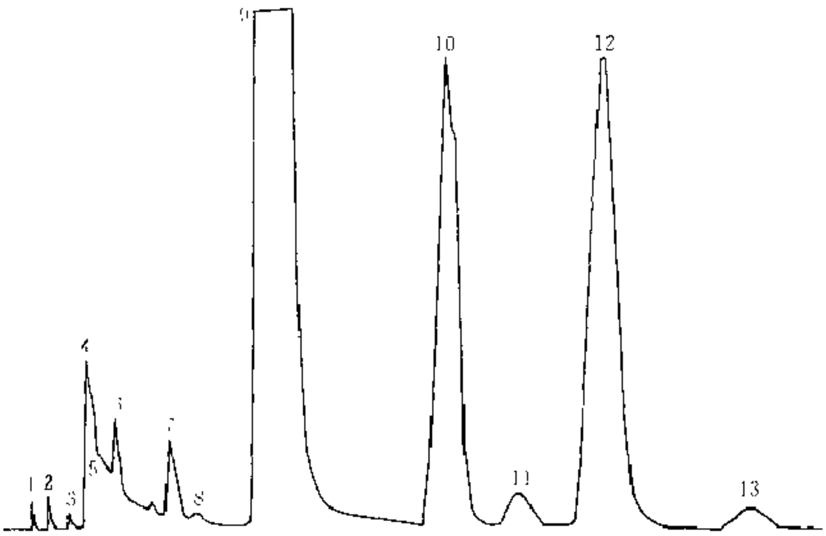


图 23-1　工业硝基甲烷[3]

色谱峰：1—空气；2—甲醛；3—乙醛；4—甲醇；5—水；6—丙酮；7—乙腈；8—未定；9—硝基甲烷；10—硝基乙烷；11—2-硝基丙烷；12—异戊醇；13—1-硝基丙烷

色谱柱：30% 硅油 DC 703，Celite 545 担体（60 目～80 目），1m×4mm 与 30% 磷酸三甲酚酯，Celite 545 担体（60 目～80 目），2m×4mm 串联

柱　温：105℃

载　气：H_2，$50ml \cdot min^{-1}$

检测器：TCD

气化室温度：150℃

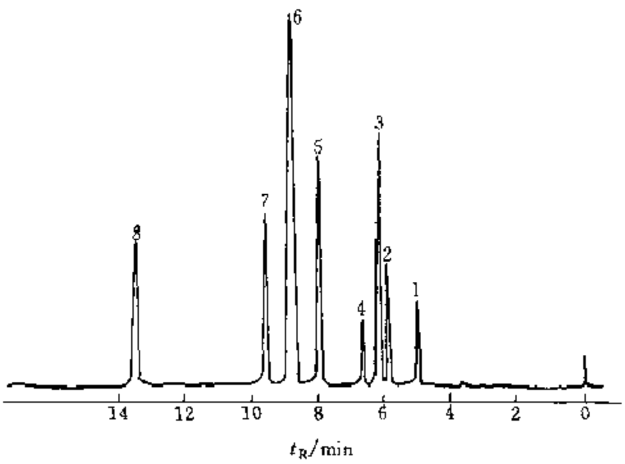


图 23-2　C_1～C_4 硝基烷(一)[4]

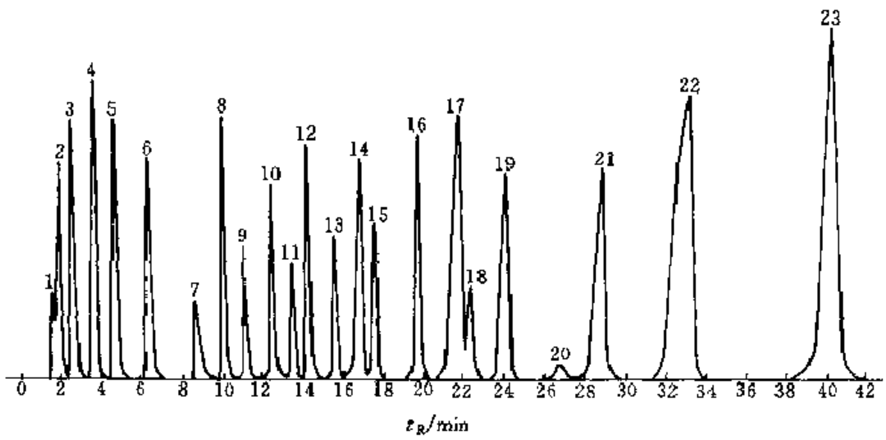
色谱峰：1—硝基甲烷；2—硝基乙烷；3—2-硝基丙烷；4—2-甲基-2-硝基丙烷；5—1-硝基丙烷；6—2-硝基丁烷；7—2-甲基-1-硝基丙烷；8—1-硝基丁烷

色谱柱：Ucon LB-550X，22m×0.27mm

柱　温：60℃

载　气：N_2，$0.6ml \cdot min^{-1}$

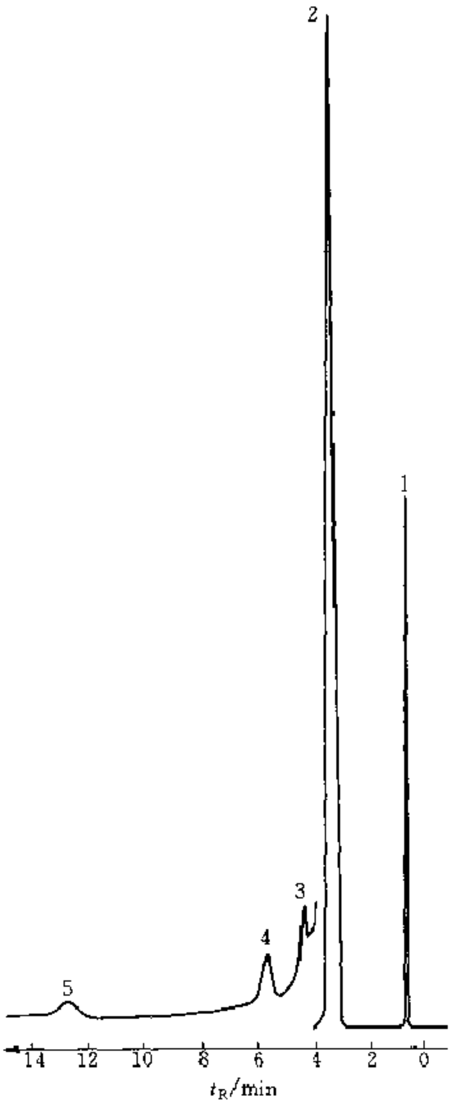
检测器：FID



色谱峰：
1—甲烷；2—乙烷；3—丙烷；4—异丁烷；5—正丁烷；6—乙醛；7 甲醇；8—丙醛；9—乙醇；10—叔丁醇+异丁醛；11—异内醇；12 正厂醛；13—正丙醇；14—硝基甲烷；15 -2-丁醇；16 异丁醇；17—硝基乙烷；18—正厂醇；19—2-硝基丙烷；20—2-甲基-2-硝基丙烷；21—1-硝基丙烷；22—2-硝基丁烷；23—1-硝基丁烷

图 23-3 C_1～C_4 硝基烷(二)[3]

色谱柱：23%己二酸二正辛酯，Chromosorb W AW（60 目～80 目），6.0m×3mm
柱 温：25℃（5min）→60°C，1.3°C·min⁻¹
载 气：He，6ml·min⁻¹
检测器：FID



色谱峰：1—苯；2—硝基苯；3—邻硝基甲苯；4—对硝基甲苯；5—间二硝基苯

色谱柱：25%甲基硅油，上海试剂厂 101 硅烷化担体（60 目～80 目），2m×4mm

柱 温：168℃ 载 气：N_2，30ml·min⁻¹

检测器：FID 气化室温度：260℃

检测器温度：260℃

图 23-4 硝基苯[4]

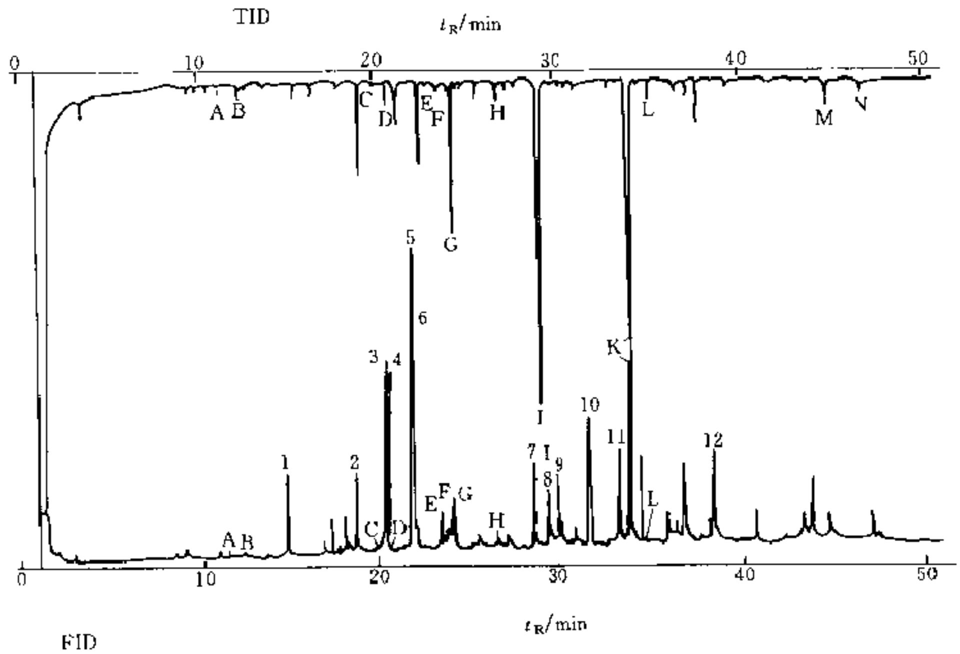
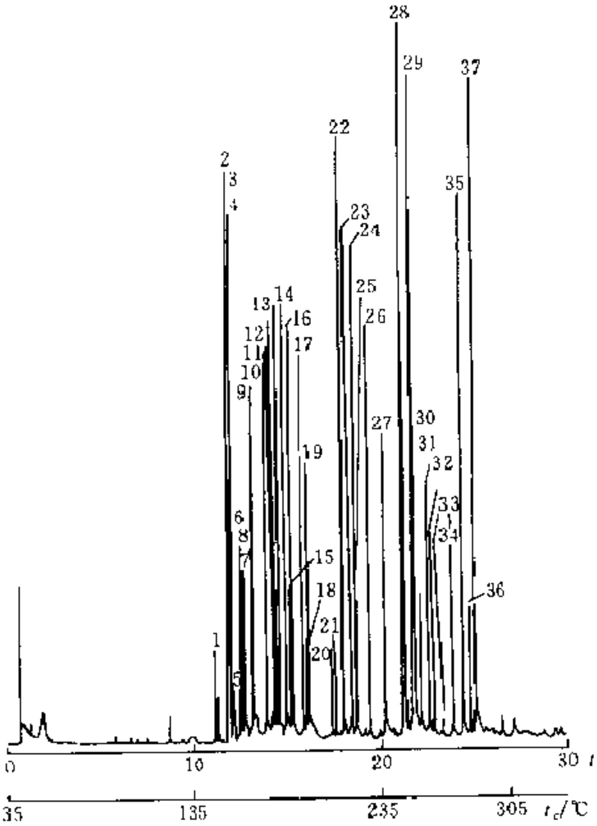


图 23-5　柴油尾气的硝基多环芳烃[5]

色谱峰：A—1-硝基萘；B—2-硝基萘；C—1,5-二硝基萘；D—1,3-二硝基萘；E—2-硝基芴；F—3-硝基-9-芴酮；G—9-硝基蒽；H—1-甲基-10-硝基蒽；I—4,4′-二硝基联苯（内标物）；K—1-硝基芘；L—2,7-二硝基-9-芴酮；M—6-硝基苯并[a]芘；N—3-硝基芘；1—9-芴酮；2—甲基-9-芴酮；3—蒽醌；4—苯二甲酸酯；5—1,8-萘羧酸酐；6—4-H-环戊[def]菲-4-酮；7,8,9—苯并芴酮；10—7-H-苯并[de]蒽-7-酮；11—苯二甲酸二辛酯；12—6-H-苯并[c,d]芘-6-酮

色谱柱：SE-54，25m×0.3mm，d_f=0.3μm　　载　气：H_2

柱　温：100℃→280℃（10min），4℃·min^{-1}　　检测器：FID与TID



色谱峰：1—5-硝基苊满；2—5-硝基-1,2,3,4-四氢萘；3—5-硝基喹啉；4—1-硝基萘；5—5-硝基-6-甲基喹啉；6—1-硝基-2-甲基萘；7—2-硝基萘；8—6-硝基喹啉；9—2-硝基联苯；10—8-硝基喹啉；11—8-硝基喹哪啶；12—8-硝基-7-甲基喹啉；13—3-硝基联苯；14—4-硝基联苯；15—4-硝基苯基醚；16,17—1,4-二硝基萘；18—4-硝基喹啉-N-氧化物；19—3-硝基二苯并呋喃；20—2-硝基芴；21—3-硝基-9-芴酮；22—1,8-二硝基萘；23—9-硝基菲；24—2,4-二硝基苯基-2-甲基苯基醚；25—1-甲基-9-硝基蒽；26—9,10-二硝基蒽；27—7-硝基-3,4-苯并香豆素；28—3-硝基荧蒽；29—1-硝基芘；30—2,5-二硝基芴；31—2,7-二硝基-9-芴酮；32—4-硝基对三联苯；33—1,3,6,8-四硝基萘；34—6-硝基䓛；35—1,3-二硝基芘；36—1,6-二硝基芘；37—1,8-二硝基芘

色谱柱：SE-54，25m×0.31mm，d_f=0.25μm

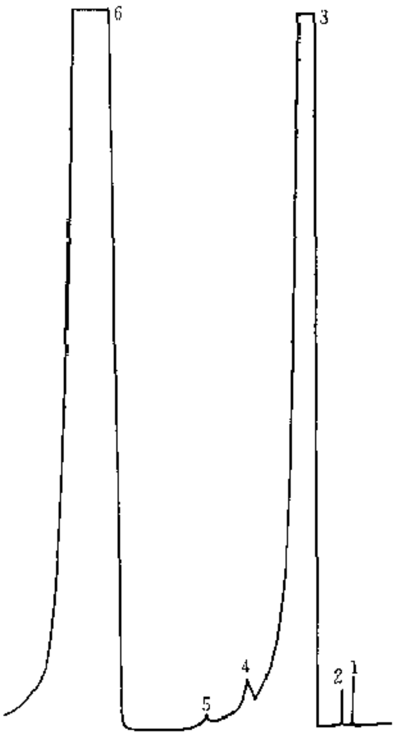
柱　温：35℃→305℃，10℃·min^{-1}

载　气：He

检测器：化学发光检测器

图 23-6　硝基多环芳烃[6]

第二节　胺与酰胺色谱图



色谱峰：1—空气；2—氨；3—甲胺；4—二甲胺；5—三甲胺；6—水

色谱柱：KOH＋四乙烯五胺＋上海试剂厂407有机担体（60目～80目）质量比为1：9：90，2m×4mm

柱　温：85℃　　载　气：H_2，60ml・min^{-1}

检测器：TCD　　气化室温度：130℃

检测器温度：110℃

图 23-7　工业甲胺水溶液[17]

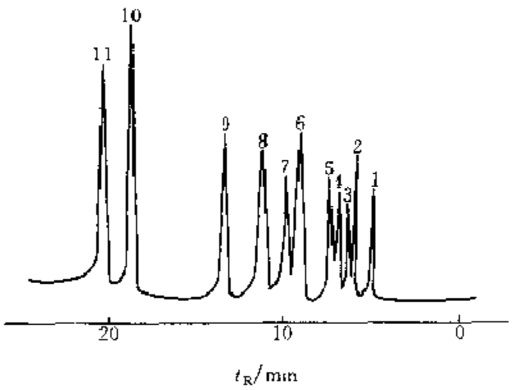


图 23-8　胺（一）[18]

色谱峰：1—三甲胺；2—二甲胺；3—甲胺；4—乙胺；5—二乙胺；6—正丙胺；7—三正丙胺；8—二正丙胺；9—正丁胺；10—三正丁胺；11—二正丁胺

色谱柱：*N*，*N*-双羟乙基丙撑二胺，50m×0.25mm

柱　温：20℃（8min）→100℃，10℃・min^{-1}

载　气：N_2，0.9ml・min^{-1}

检测器：FID

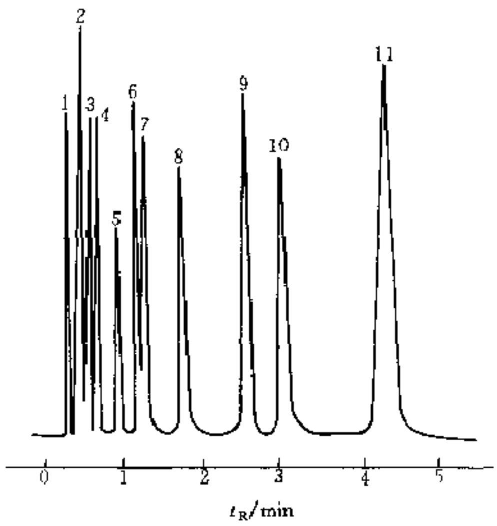


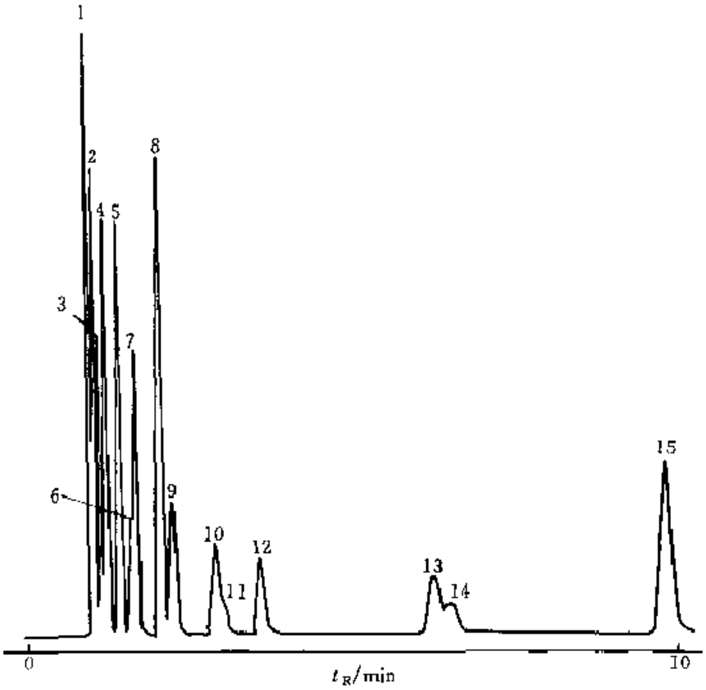
图 23-9　胺（二）[19]

色谱峰：1—甲胺；2—二甲胺；3—乙胺；4—三乙胺；5—异丙胺；6—烯丙胺；7—正丙胺；8—叔丁胺；9—二乙胺；10—异丁胺；11—正丁胺

色谱柱：4% Carbowax 20M－0.8% KOH，Carbopack B（100目～120目），1.5m

柱　温：90℃　　载　气：H_2，350 kPa

检测器：FID



色谱峰：1—乙胺；2—叔丁胺；3—二乙胺；4—二异丙胺+三乙胺；5—仲丁胺；6—异丁胺；7—烯丙胺；8—正丁胺；9—二丙胺；10—异戊胺；11—二丙胺，二异丁胺；12—正戊胺；13—二丁胺；14—正己胺；15—正庚胺

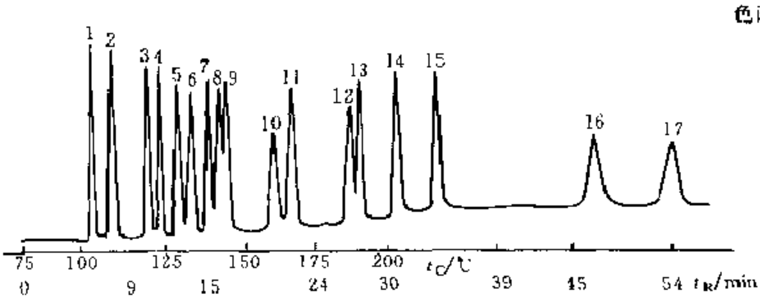
色谱柱：CP-Wax，25m×0.53mm，d_f=2μm

柱　温：60℃（2min）→100℃，5℃·min^{-1}

载　气：N_2，10ml·min^{-1}

检测器：FID

图 23-10　胺（三）[10]



色谱峰：1—乙胺；2—异丙胺；3—正丙胺；4—二乙胺；5—仲丁胺；6—异丁胺；7—二异丙胺；8—正丁胺；9—二乙胺；10—异戊胺；11—二正丙胺；12—二仲丁胺；13—二异丁胺；14—三正丙胺；15—二正丁胺；16—*N*-(2-甲基-1-丁基)-1-戊胺；17—三正丁胺

图 23-11　胺（四）[12]

色谱柱：28% Pennwalt 223－4% KOH，Gas Chrom R（80目～100目），3.05m×6mm

柱　温：75℃→200℃，4℃·min^{-1}

载　气：He，15ml·min^{-1}

检测器：TCD

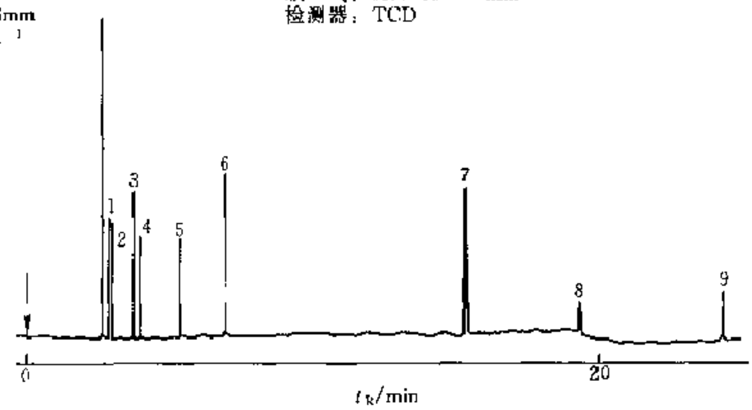


图 23-12　胺（五）[11]

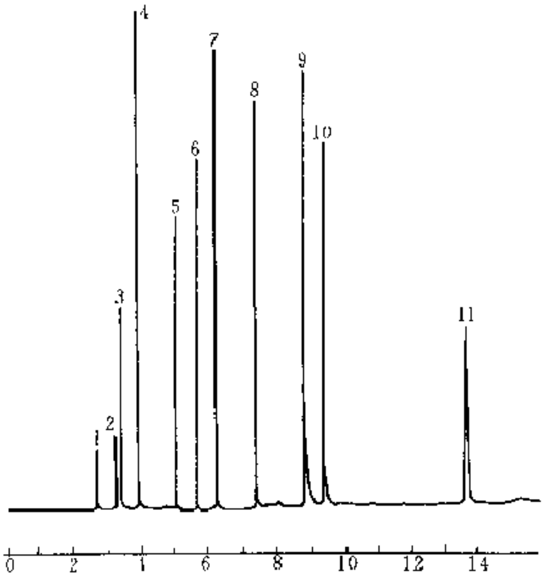
色谱峰：1—二异丙胺；2—2-氨基丁烷；3—二异丁胺；4—1-氨基戊烷；5—二正丁胺；6—吡啶；7—1-氨基癸烷；8—二环己胺；9—2,6-二甲基胺

色谱柱：CP Wax 51，25m×0.22mm，d_f=0.2μm

柱　温：70℃→210℃，3℃·min^{-1}

载　气：N_2，70kPa

检测器：FID



色谱峰：1—叔丁基胺；2—仲丁基胺；3—异丁基胺；4—正丁基胺；5—异戊基胺；6—正戊基胺；7—环己基胺；8—正己基胺；9—苯基胺；10—正庚基胺；11—正辛基胺

色谱柱：石墨化炭黑 Vulcan＋Carbowax 1500，30m×0.25mm

柱　温：45℃(2min)→165℃，15℃·min^{-1}

载　气：He，u＝30cm·s^{-1}

检测器：FID

图 23-13　胺（六）[11]

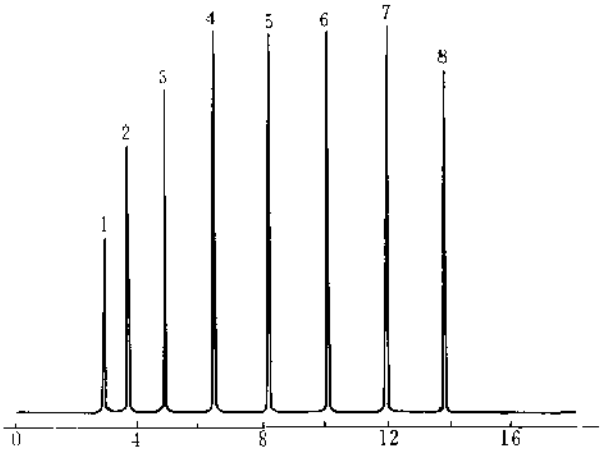


图 23-14　伯胺（一）[11]

色谱峰：1—丙胺；2—丁胺；3—戊胺；4—己胺；5—庚胺；6—辛胺；7—壬胺；8—癸胺

色谱柱：Carbowax Amine，30m×0.53mm，d_f＝1.0μm

柱　温：50℃→200℃(10min)，8℃·min^{-1}

载　气：He，$\overline{u}$＝20cm·s^{-1}（170℃）

检测器：FID　　　　气化室温度：220℃

检测器温度：220℃

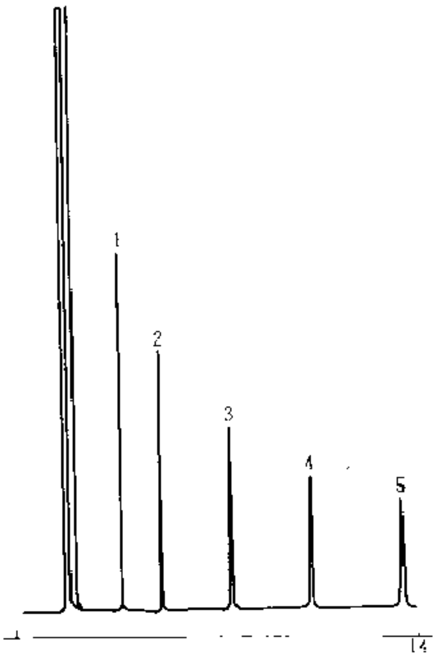


图 23-15　伯胺（二）[11]

色谱峰：1—正辛胺；2—正壬胺；3—正癸胺；4—苄胺；5—双环己胺

色谱柱：CAM，30m×0.25mm，d_f＝0.25μm

柱　温：110℃

载　气：H_2，u＝40cm·s^{-1}

检测器：FID

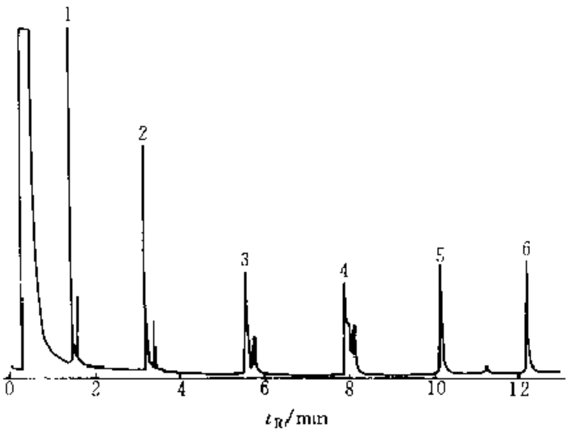


图 23-16　伯胺（三）[15]

色谱峰：1—正辛胺；2—正癸胺；3—正十二胺；4—正十四胺；5—正十六胺；6—正十八胺

色谱柱：OV-73，10m×0.25mm

柱　温：80℃→210℃，10℃·min⁻¹

载　气：H_2，u=50cm·s⁻¹

检测器：FID

气化室温度：225℃

检测器温度：325℃

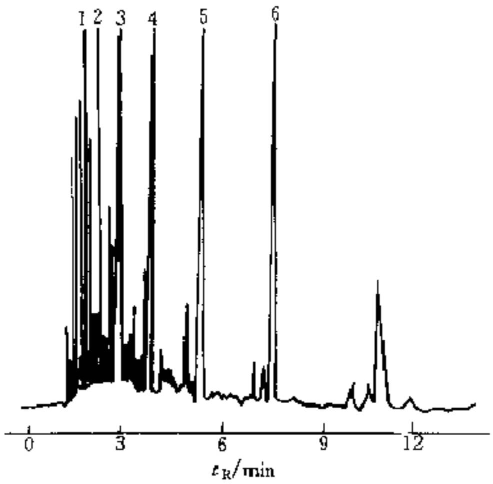


图 23-17　叔胺[16]

色谱峰：1—N,N-二甲基九碳叔胺；2—N,N-二甲基十碳叔胺；3—N,N-二甲基十一碳叔胺；4—N,N-二甲基十二碳叔胺；5—N,N-二甲基十三碳叔胺；6—N,N-二甲基十四碳叔胺

色谱柱：FFAP，22m×0.3mm

柱　温：170℃

载　气：N_2，13cm·s^{-1}

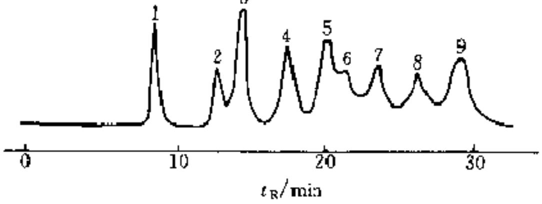


图 23-18　二甲基苯胺[18]

色谱峰：1—苯胺；2—邻甲基苯胺；3—对甲基苯胺+间甲基苯胺；4—2,6-二甲基苯胺；5—2,5-二甲基苯胺；6—2,4-二甲基苯胺；7—3,5-二甲基苯胺；8—2,3-二甲基苯胺；9—3,4-二甲基苯胺

色谱柱：10%丁二酸二丁酯+0.4%双甘油，Celite 545(60目～80目)，2.25m×6mm

柱　温：130℃　　　　检测器：TCD

载　气：He，120ml·min⁻¹

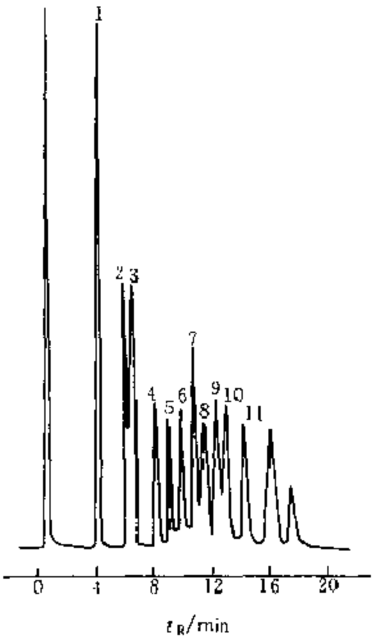


图 23-19 烷基苯胺[19]

色谱峰：1—N,N-二甲基苯胺；2—苯胺；3—N-甲基苯胺；4—邻甲基苯胺；5—间甲基苯胺；6—对甲基苯胺；7—2,6-二甲基苯胺；8—2,4-二甲基苯胺；9—邻乙基苯胺；10—对乙基苯胺；11—2,3-二甲基苯胺
色谱柱：1.5% Ucon 50 HB-2000，Chromosorb G(70目～80目)，2.9m×6mm
柱　温：120℃　　气化室温度：270℃
载　气：He　　检测器温度：310℃
检测器：FID



图 23-20 烷基苯异丙胺[20]

色谱峰：1—苯异丙胺；2—甲基苯异丙胺；3—乙基苯异丙胺；4—异丙基苯异丙胺；5—甲基乙基苯异丙胺；6—正丁基苯异丙胺；7—甲基异丙基苯异丙胺
色谱柱：10% OV-101＋5% KOH，Chromosorb W AW (180μm～200μm)，10m×0.8mm
柱　温：150℃
载　气：N_2，396kPa
检测器：FID

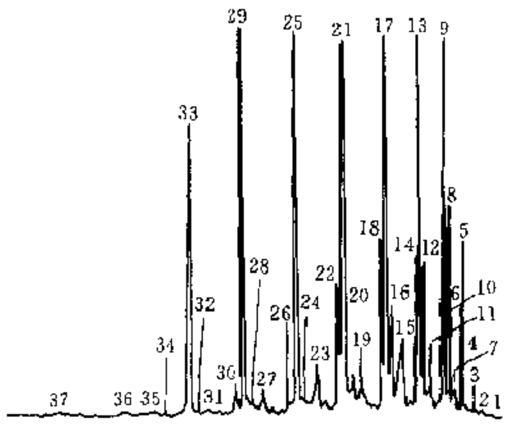


图 23-21 工业脂肪叔胺[21]

色谱峰：1—叔己胺；2—正庚醇；3—叔庚胺；4—正辛醇；5—α-十一烯；6—叔辛胺；7—正壬醇；8—α-十二烯；9—叔壬胺；10—仲癸醇；11—正癸醇；12—α-十三烯；13—叔癸胺；14—仲十一醇；15—正十一醇；16—α-十四烯；17—叔十一胺；18—仲十二醇；19—正十二醇；20—α-十五烯；21—叔十二胺；22—仲十三醇；23—正十三醇；24—α-十六烯；25—叔十三胺；26—仲十四醇；27—正十四醇；28—α-十七烯；29—叔十四胺；30—仲十五醇；31—正十五醇；32—α-十八烯；33—叔十五胺；34—仲十六醇；35—正十六醇；36—叔十六胺；37—仲十七醇
色谱柱：甲基乙烯基硅酮交联毛细管柱，32m×0.25mm
柱　温：150℃→260℃，5℃·min^{-1}
载　气：H_2、N_2，137.1kPa（分流比130：1）
检测器：FID
气化室温度：280℃　　检测器温度：280℃

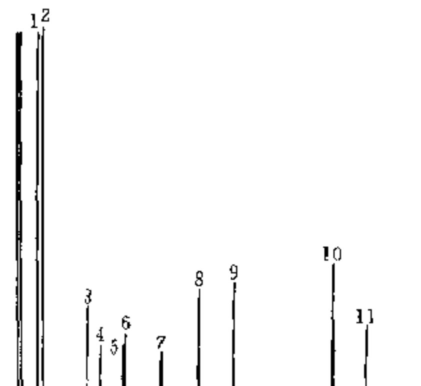


图 23-22 芳胺[22]

色谱峰：1—吡啶；2—2-甲基吡啶；3—苯胺；4—苄胺；5—邻甲苯胺；6—间甲苯胺；7—2,6-二甲基苯胺；8—1,4-苯基二胺；9—萘胺；10—联苯胺；11—二苄胺
色谱柱：BP5，12m×0.53mm，d_f=1.0μm
柱　温：60℃→190℃，10℃·min^{-1}
检测器：FID

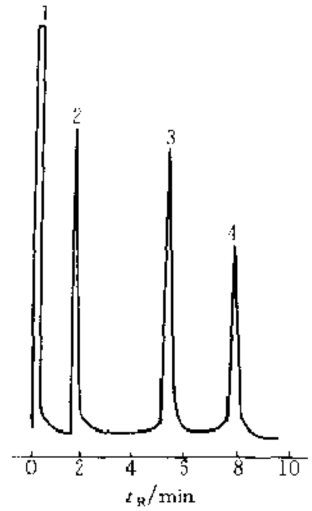


图 23-23　乙醇胺[23]

色谱峰：1—甲醇；2—单乙醇胺；3—二乙醇胺；4—三乙醇胺
色谱柱：Tenax-GC（60 目～80 目），1.2m×3mm＋5%硼酸，Chromosorb P(80 目～100 目)，0.3m×3mm
柱　温：135℃(1min)→350℃，16℃·min^{-1}
载　气：N_2，25ml·min^{-1}　　检测器：FID
气化室温度：350℃　　检测器温度：320℃

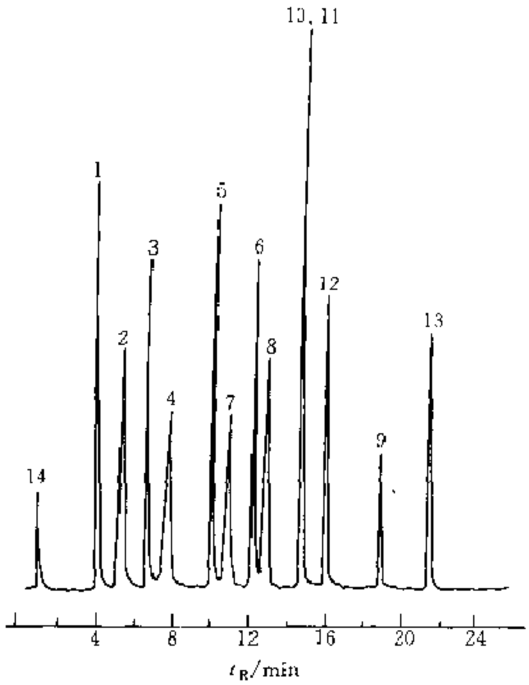


图 23-24　硝基胺[24]

色谱峰：1—二甲基硝基胺；2—甲基乙基硝基胺；3—二乙基硝基胺；4—甲基正丙基硝基胺；5—二异丙基硝基胺；6—二正丙基硝基胺；7—甲基正丁基硝基胺；8—甲基正戊基硝基胺；9—二正丁基硝基胺；10—硝基吡啶；11—硝基吡咯；12—硝基吗啉；13—甲基正庚基硝基胺；14—溶剂
色谱柱：Durawax 2，30m×0.25mm
柱　温：40℃(1min)→180℃，2.5℃·min^{-1}
载　气：He，150kPa
检测器：FID
气化室温度：200℃

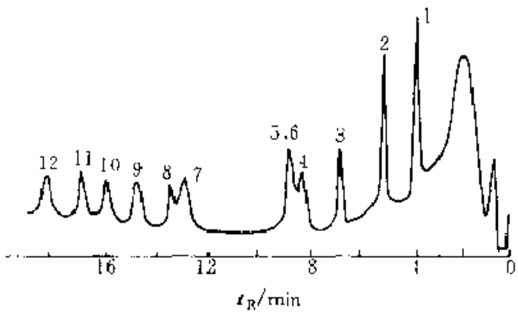


图 23-25　亚硝胺（一）[25]

色谱峰：1—N-二甲基亚硝胺；2—N-二乙基亚硝胺；3—N-二异丙基亚硝胺；4—N-二正丙基亚硝胺；5—N-甲基丁基亚硝胺；6—N-二异丁基亚硝胺；7—N-甲基苯基亚硝胺；8—N-二丁基亚硝胺；9—N-亚硝基哌啶；10—N-亚硝基吡咯烷；11—N-亚硝基吗菲啉；12—N-二正戊基亚硝胺
色谱柱：13% FFAP，Chromosorb W AW-DMCS(80 目～100 目)，3m×2mm
柱　温：90℃(4min)→160℃，4℃·min^{-1}
载　气：N_2，30ml·min^{-1}
检测器：NPD
气化室温度：220℃
检测器温度：300℃

色谱峰：1—N-亚硝基二甲基胺；2—N-亚硝基甲基乙基胺；3—N-亚硝基二乙基胺；4—N-亚硝基吖丁啶；5—N-亚硝基哌啶；6—N-亚硝基吗啉；7—N-亚硝基吡咯烷；8—N-亚硝基己基甲叉胺
色谱柱：Rt_x-200，30m×0.53mm，d_f＝0.50μm
柱　温：100℃(1min)→200℃，5℃·min^{-1}
载　气：H_2，$\bar{u}$＝40cm·s^{-1}
检测器：FID

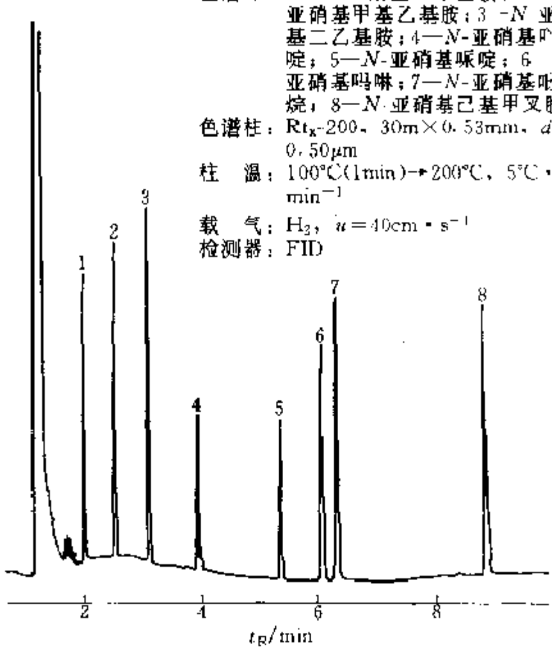


图 23-26　亚硝胺（二）[26]

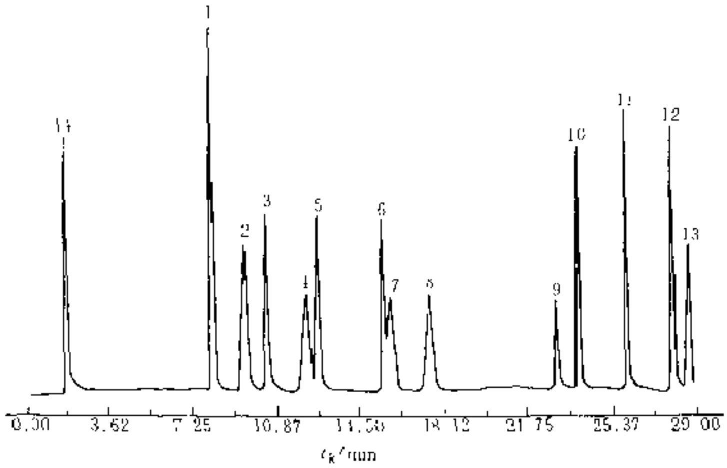


图 23-27 亚硝胺（三）[24]

色谱峰：1—二甲基亚硝胺；2—甲基乙基亚硝胺；3—二乙基亚硝胺；4—甲基正丙基亚硝胺；5—二异丙基亚硝胺；6—二正丙基亚硝胺；7—甲基正丁基亚硝胺；8—甲基正戊基亚硝胺；9—二正丁基亚硝胺；10—亚硝基哌啶；11—未知物；12—亚硝基吗啉；13—甲基正乙基亚硝胺；14—溶剂

色谱柱：CP—57，50m×0.32mm

载　气：He，1.4bar

柱　温：50℃(1min)→200℃，2.5℃·min^{-1}

气化室温度：200℃

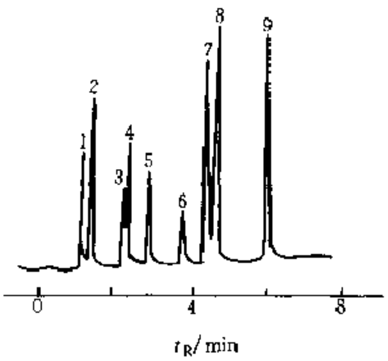


图 23-28 胺及吡嗪[27]

色谱峰：1—1,2-乙二胺；2—吡咯烷；3—吡嗪；4—N-甲基乙烯二胺；5—哌嗪；6—N-乙基乙烯二胺；7—N-甲基哌嗪；8—2-甲基吡嗪；9—2-乙基吡嗪

色谱柱：1.5% Ucon 50 HB-2000+0.8% KOH，Carbopack B（60 目～80 目），10m×2mm

柱　温：100℃→200℃，8℃·min^{-1}

载　气：He，20ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：300℃

检测器温度：250℃

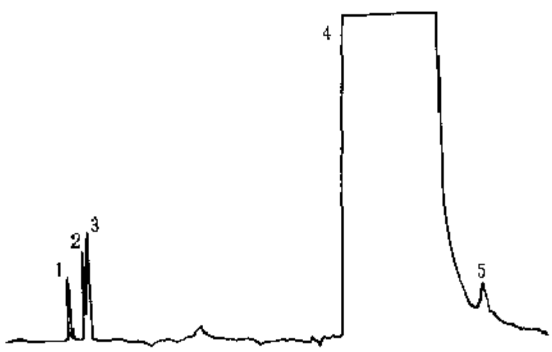


图 23-29 丙烯酰胺水溶液中杂质[28]

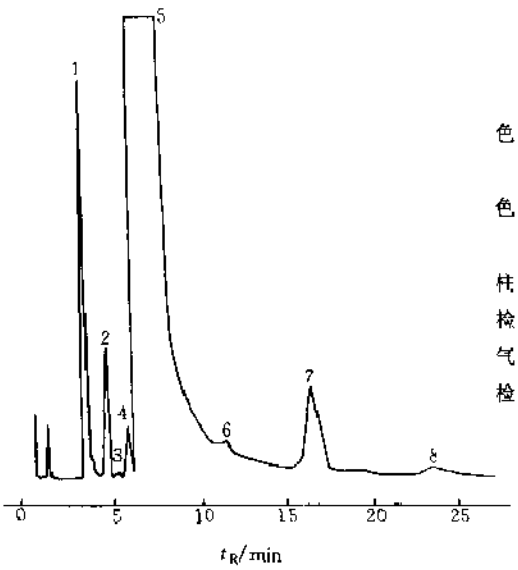
色谱峰：1—丙烯醛；2—丙烯腈；3—乙腈；4—丙烯酰胺；5—β-羟基丙腈

色谱柱：XE-60，50m×0.25mm，d_f=0.6μm

柱　温：60℃(8min)→150℃(30min)，10℃·min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FID



色谱峰：1—乙醇(内标)；2—乙腈；3—丙烯醛；4—丙酮；5—丙烯腈；6—丙腈；7—甲基丙烯腈；8—丁烯腈
色谱柱：GDX-102与上海试剂厂402担体(80目～100目，混装)，4m×3mm
柱　温：120°C
检测器：FID
气化室温度：150°C
检测器温度：180°C

图 23-30　丙烯腈中杂质[29]

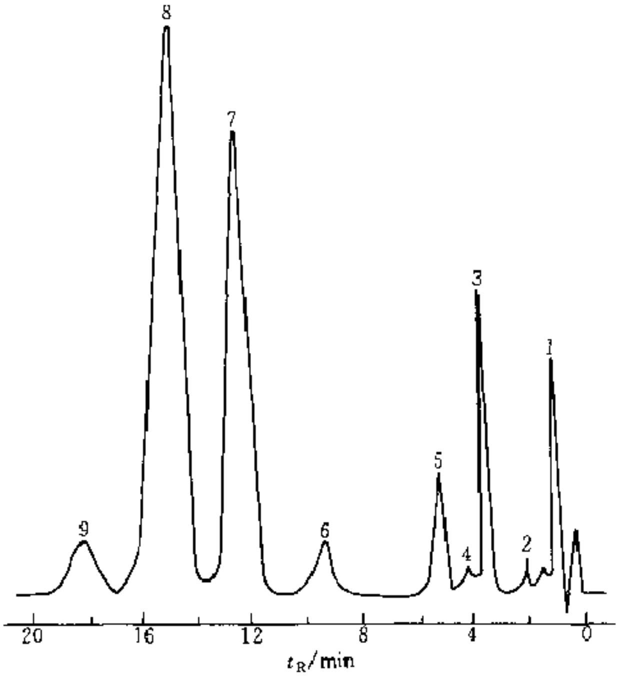


图 23-31　甲基丙烯腈[30]

色谱峰：1—氰化氢；2—丙酮；3—乙腈；4—丙烯醛；5—丙烯腈；6—甲基丙烯醇；7—甲基丙烯腈；8—乙酸乙酯；9—异丁腈
色谱柱：GDX-103(60目～80目)，2m×3mm
柱　温：100°C
检测器：FID

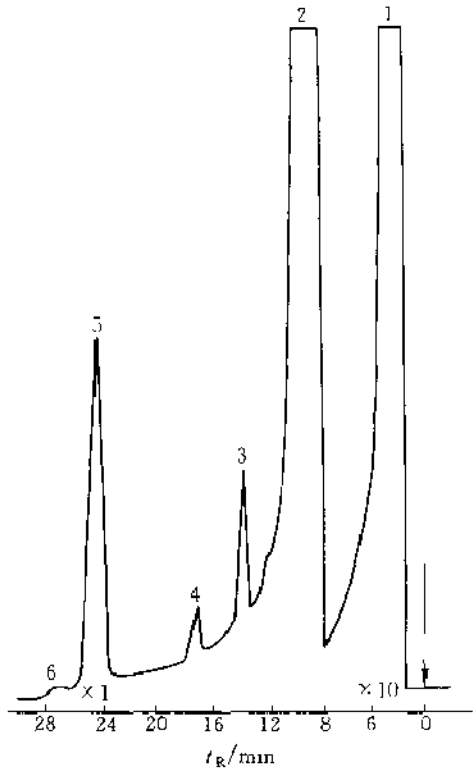


图 23-32　丁二烯中微量乙腈[31]

色谱峰：1—丁二烯；2—丙酮；3，4—未定；5—4-乙烯基-1-环己烯；6—乙腈
色谱柱：25% Carbowax 1500，上海试剂厂301釉化担体(60目～80目)，4m×4mm
柱　温：70°C　　载　气：N_2，60ml·min^{-1}
检测器：FID　　气化室温度：150°C
检测器温度：120°C

第三节　吡啶与其他含氮化合物色谱图

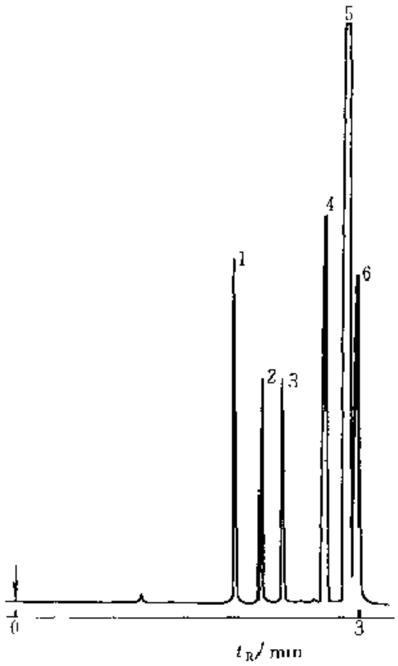
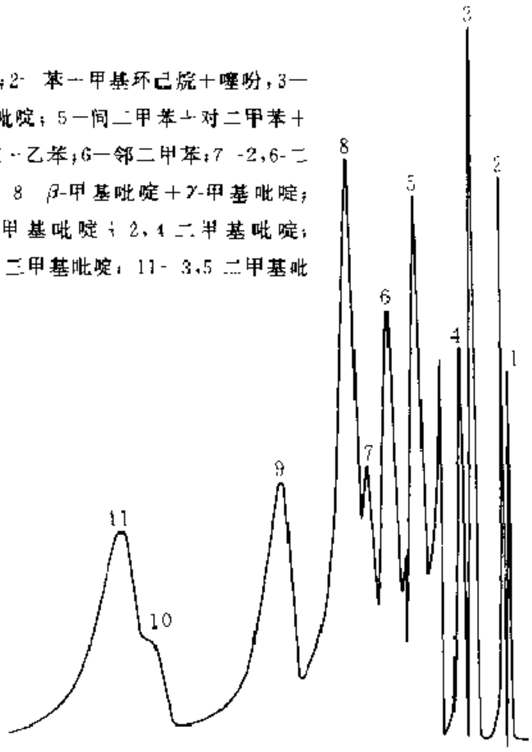


图 23-33　吡啶（一）[42]

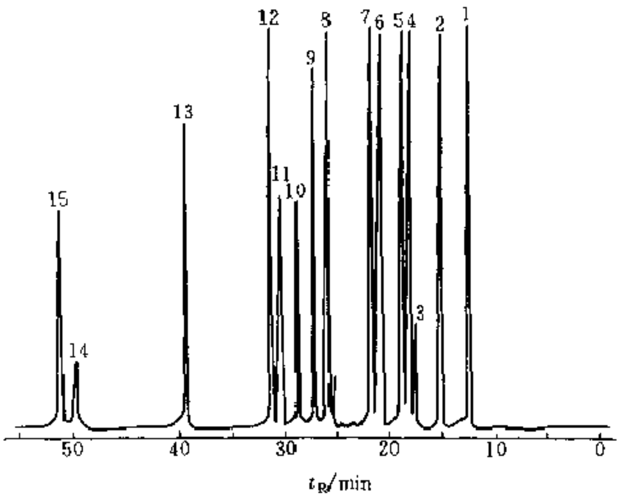
色谱峰：1—吡啶；2—2-甲基吡啶；3—2,6-二甲基吡啶；4—2 乙基吡啶；5—3 甲基吡啶；6—4-甲基吡啶
色谱柱：CP—Sil 43 CB，10m×0.10mm，d_f=0.2μm
柱　温：110°C
载　气：N_2，150kPa
检测器：FID



色谱峰：1—环已烷；2—苯—甲基环已烷＋噻吩，3—甲苯；4—吡啶；5—间二甲苯＋对二甲苯＋α-甲基吡啶＋乙苯；6—邻二甲苯；7—2,6-二甲基吡啶；8—β-甲基吡啶＋γ-甲基吡啶；9—2,5-二甲基吡啶＋2,4-二甲基吡啶；10—2,4,6-三甲基吡啶；11—3,5-二甲基吡啶

图 23-34　吡啶（二）[43]

色谱柱：10% OV-17，6201 釉化担体(60 目～80 目)，2m×3mm
柱　温：80°C
载　气：N_2，50ml·min^{-1}
检测器：FID
气化室温度：180°C
检测器温度：130°C



色谱峰：1—2-皮考啉；2—2,6-二甲基吡啶；3—乙基吡啶；4—3-皮考啉；5—4-皮考啉；6—2,5-二甲基吡啶；7—2,4-二甲基吡啶；8—4-乙基吡啶；9—3,5-二甲基吡啶；10—2,6-二乙基吡嗪；11—2,5-二乙基吡嗪；12—3,4-二甲基吡啶；13—2-乙酰基吡啶；14—4-乙酰基吡啶；15—3-乙酰基吡啶
色谱柱：PEG-1540－KOH，60m×0.18mm
载　气：N_2
检测器：FID

图 23-35　二甲基吡啶[44]

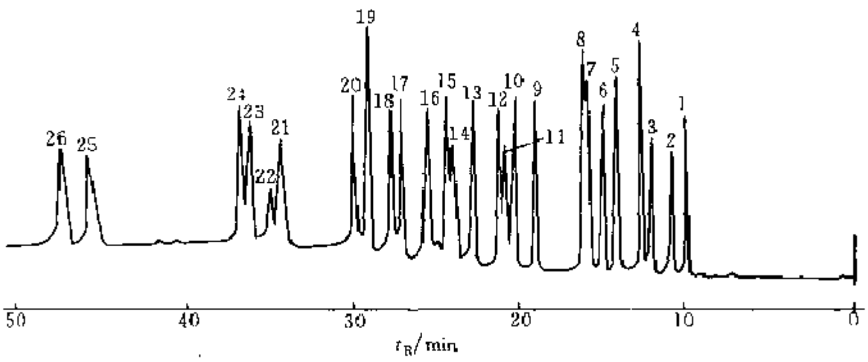


图 23-36 烷基乙基吡啶[35]

色谱峰：1—3-甲基哌啶；2—哌啶；3—3-甲基哌啶；4—吡啶；5—2-甲基吡啶；6—2,6-二甲基吡啶；7—2-甲基-6-乙基吡啶；8—2-乙基吡啶；9—3-甲基吡啶；10—4-甲基吡啶；11—2-正丙基吡啶；12—2,5-二甲基吡啶；13—2,4-二甲基吡啶；14—2,3-二甲基吡啶；15—2,4,6-三甲基吡啶；16—4-甲基-2-乙基吡啶；17—4-乙基吡啶；18—2-甲基-5-乙基吡啶；19—3,5-二甲基吡啶；20—2-甲基-3-乙基吡啶；21—4-正丙基吡啶；22—2,3,5-三甲基吡啶；23—吡咯；24—3,4-二甲基吡啶；25—4-甲基-3-乙基吡啶；26—3-甲基-4-乙基吡啶

色谱柱：*N*，*N'*-双羟乙基亚丙基二胺，50m×0.25mm　　载　气：N_2，0.8ml·min^{-1}

柱　温：80℃(10min)→100℃，1.25℃·min^{-1}　　检测器：FID

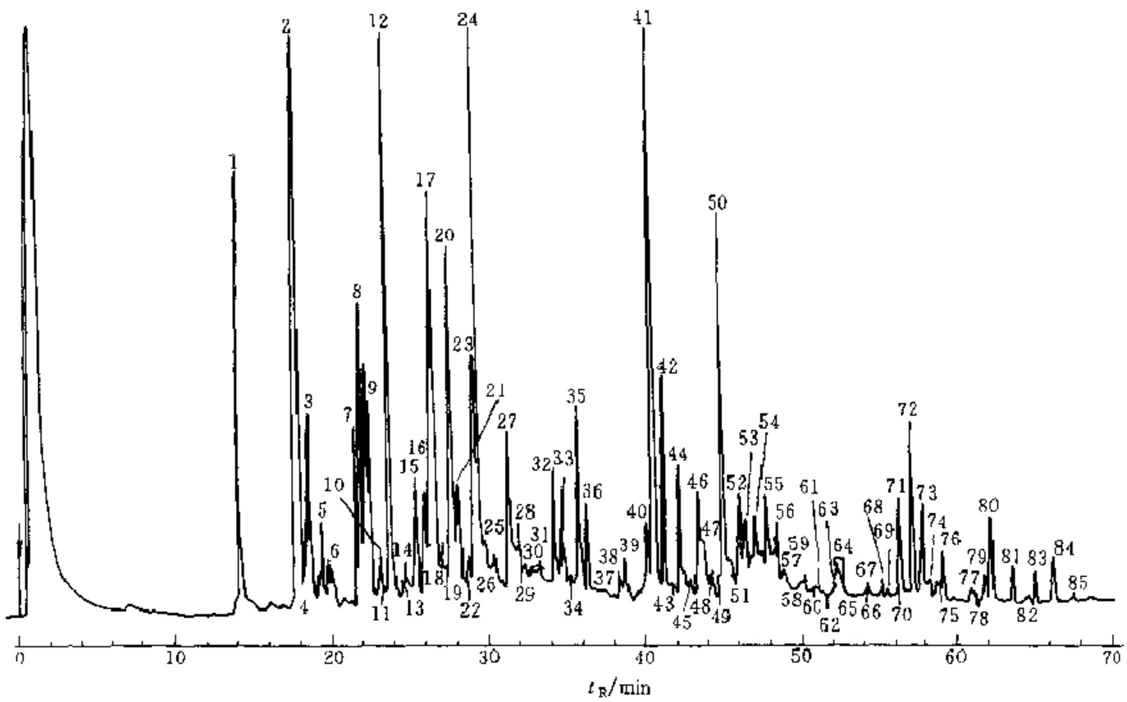


图 23-37 煤液化产品中碱性氮化合物[36]

色谱峰：1—C_2-烷基苯胺；2,3,4—C_3-烷基苯胺；5—喹啉；6,7,8,9,10,11—C_4-烷基苯胺；12,19—甲基四氢化喹啉；13,14—甲基喹啉；15,16—C_5-烷基苯胺；17,37—C_2-烷基四氢化喹啉；18,21—C_2-烷基喹啉；20,22—$C_{14}H_{21}N$；23,24,27,28,29—过氢化苯并喹啉；25,30,31—甲基过氢化苯并喹啉；26—氨基四氢化萘；32—$C_{12}H_{17}N$；33,35—$C_{12}H_{17}N$；34—C_3-烷基四氢化喹啉；36—$C_{12}H_{17}N$；37—C_2-烷基四氢喹啉；38—C_4-烷基四氢化喹啉；39—$C_{13}H_{19}N$；40—$C_{15}H_{25}N$；41,42,43,50—辛基氢化苯并喹啉；44,45,52,53,54,55—甲基辛基氢化苯并喹啉；46—$C_{13}H_{19}N$；47,57—C_2-烷基辛基氢化苯并喹啉；48—$C_{16}H_{27}N$；49—$C_{14}H_{13}N$；51—苯并喹啉；56—$C_{17}H_{29}N$；58,61—甲基苯并喹啉；59—$C_{15}H_{17}N$；60—甲基辛基氢化苯并喹啉；62—C_3-烷基辛基氢化苯并喹啉；63,65,66—C_2-烷基苯并喹啉；64—$C_{15}H_{19}N$；67,71—$C_{15}H_{15}N$；68～70—$C_{17}H_{23}N$；72,74,75—$C_{16}H_{21}N$；73—$C_{17}H_{25}N$；76～79—$C_{16}H_{17}N$；80—$C_{15}H_{17}N$；81—$C_{18}H_{21}N$；82,84—$C_{17}H_{15}N$；83—$C_{17}H_{13}N$；85—$C_{18}H_{19}N$

色谱柱：SP-2250 SCOT 柱，40m　　载　气：H_2，$\bar{u}$=85.1cm·s^{-1}

柱　温：85℃(4min)→285℃，3℃·min^{-1}　　检测器：FID

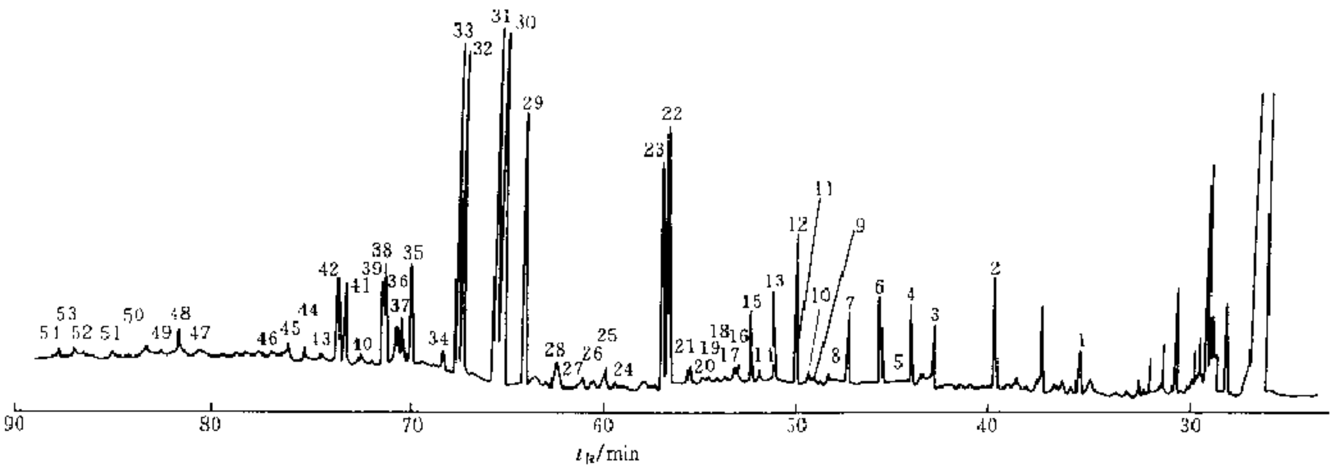


图 23-38　催化汽油中碱性氮化合物[36]

色谱峰：1—吡啶；2—2-甲基吡啶；3—4-甲基吡啶；4—2,3-二甲基吡啶；5—2-苯基吖丁啶；6—2-乙基吡啶；7—3,4-二甲基吡啶；8—2,4-二甲基吡啶；9—3-乙基-4-甲基吡啶；10—3-乙基吡啶；11—2-甲基-6-乙基吡啶；12—苯胺；13—2,4,6-三甲基吡啶；14—2-丁基吡啶；15—2,3,6-三甲基吡啶；16—2-甲基-6-乙基吡啶；17—2-甲基-4-乙基吡啶；18—3-乙基-5-乙基吡啶；19—C_3吡啶；20—2,4-二甲基-6-乙基吡啶；21—2-顺丁基吡啶；22—2-甲基苯胺；23—4-乙基吡啶；24,25,27,38,39,40,41,—C_4吡啶；26—N-乙基-1-乙基苯胺；28—N-乙基-3-乙基苯胺；29—5-乙基-2-甲基吡啶；30—2,3-二甲基苯胺；31—2,6-二甲基苯胺；32—3,4-二甲基苯胺；33—2,5-二甲基苯胺；34—N-乙基-2-甲基苯胺；35—N-甲基-N-苯基甲酰胺；36—4-(1,1-二甲基乙基)吡啶；37—2,6-二甲基-3-乙基吡啶；42—2,6-二甲基-4-乙基吡啶；43—2-甲基喹啉；44，45，46—C吡啶；47—C_2喹啉；48—2,6-二甲基喹啉；49—2,4-二甲基喹啉；50—5-氨基-4-苯基嘧啶；51—2-异丙基喹啉；52—2,3,4-三甲基喹啉；53，54—C_3喹啉

色谱柱：OV-101 SCOT柱，75m×0.35mm

载气：N_2，$\bar{u}=12cm \cdot s^{-1}$

柱　温：50℃→200℃，2℃·min^{-1}

检测器：FID

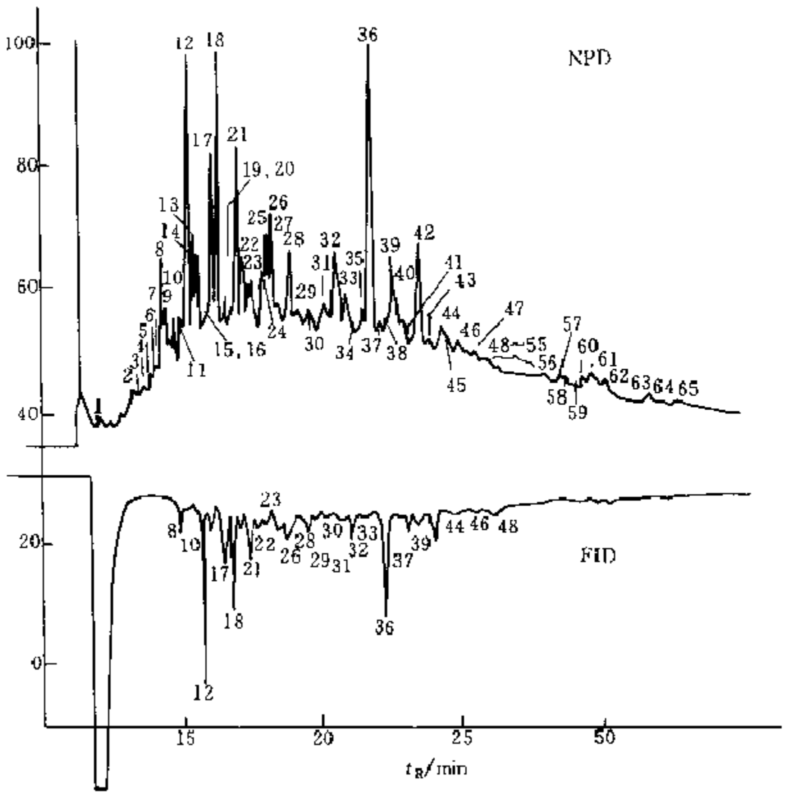


图 23-39 柴油馏分中碱性氮化合物[37]

色谱峰：1—未知物；2—C_2-四氢化喹啉；3—C_3-四氢化喹啉；4,5—C_4-四氢化喹啉；6—C_5-二氢喹诺酮；7—C_5-吡啶；8—C_5-吡啶—C_5-四氢化喹啉；9—C_6-吡啶—C_5-二氢喹诺酮；10—C_6-吡啶+C_6-二氢喹诺酮；11，12—C_6-二氢喹诺酮；13—C_2 喹啉+C_6-吡啶+C_6-二氢喹诺酮；14—C_6-吡啶+C_6-四氢化喹啉；15—C_6-吡啶+C_5-二氢喹诺酮；16—C_3-喹啉；17—C_3-喹啉+C_6-吡啶+C_8-四氢化喹啉；18—C_3 喹啉或 C_8—吲哚；19—C_7-二氢喹诺酮+C_4-喹诺酮+C_8 吡啶；20，21—C_4-喹啉；22—C_9-吡啶+C_5-四氢喹啉；23—C_5 喹啉+C_8-二氢喹诺酮；24—C_4-喹啉+C_8 吡啶+C_5 二氢喹诺酮；25，26—C_7-喹啉、C_8-喹诺酮；27—C_5-喹啉+C_8-喹诺酮+C_9 二氢喹诺酮；28—C_9 喹啉+C_9 吡啶+C_9 二氢喹诺酮；29—C_5-喹啉+C_9-二氢喹诺酮；30—C_5-喹啉+C_{10}-二氢喹诺酮；31—C_6-喹啉+C_9-喹诺酮+C_{10}-二氢喹诺酮；32，36—C_6-喹啉；33—C_5-喹啉；34，37—C_6-喹啉+C_{10}-喹诺酮；35—C_6-喹啉+C_9-喹诺酮；38—C_6-喹啉+C_{10}-喹诺酮+C_2-环戊并喹啉；39，40，42—C_7-喹啉；41，43—C_7-喹啉+C_{10}-喹诺酮；44—C_8-喹啉+C_{10}-喹诺酮+C_3-环戊并喹啉；45—C_9-喹啉+C_{10} 喹诺酮+C_3-环戊并喹啉；46—C_{10}-喹啉+C_{11}-喹诺酮，C_4-环戊并喹啉；47—C_{10} 喹啉+C_{11}-喹诺酮+C_2-咔唑；48—C_1-苯并喹啉+C_{11}-喹啉；49，50—C_{11}-喹啉+C_{11}-喹诺酮；51—C_{11}-喹诺酮+C_{10} 二氢喹诺酮；52—C_{10}-二氢喹诺酮+C_{12}-喹诺酮；53，54—C_{10}-二氢喹诺酮+C_{13}-喹诺酮；55—C_{12}-喹啉+C_7-环戊并喹啉；56—C_{13}-喹啉+C_{11}-喹诺酮；57—C_{12}-喹啉+C_7-环戊并喹啉+C_{13} 喹诺酮；58—C_{12}-喹啉+C_8-环戊并喹啉+C_{13}-喹诺酮；59—C_{12}-喹啉+C_9-环戊并喹啉+C_{13}-喹诺酮；60—C_2-苯并喹啉+C_{13}-喹诺酮；61，62，63—C_2-苯并喹啉；64，65—C_3-苯并喹啉

色谱柱：OV-17 PLOT 柱，42m×0.3mm

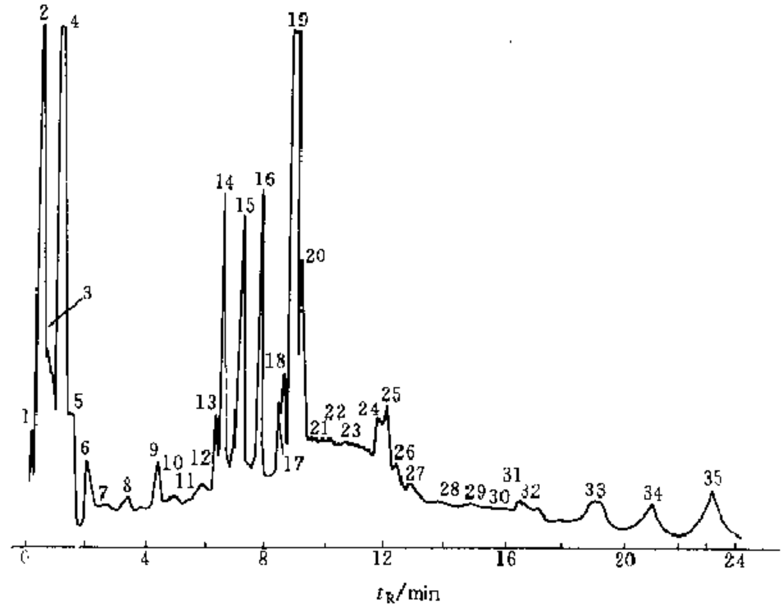
柱　温：180℃(2min)→260℃，3℃·min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FID 和 NPD

气化室温度：300℃

检测器温度：FID 300℃



色谱峰：1－正戊烷；2—正己烷；3—己烯-2；4 环己烷；5—C_7H_{14}＋辛烷；6—环己烯；7，8 壬烷；9—苯；10—正丙基环己烷；11—正癸烷；12—2-甲基癸烷；13 2-氨基己烷；14—2-甲基全氢吡啶；15—5-甲基十一烷；16 正十二烷；17—$C_{12}H_{24}$；18—环己胺；19—2-甲基吡啶；20—正己基环己烷；24—3-苯基己烷；26—正己基苯；27 2苯基己烷；29，32—十八碳烷；33—2-甲基-(5己基)吡啶；34—庚基吡啶；35—2-甲基己基吡啶；21～23，25，28，30，31—未定

色谱柱：10% PEG-1000，405担体(60目～80目)，2m×4mm

柱　温：80℃

载　气：He

检测器：MS

气化室温度：180℃

图 23-40　2-甲基吡啶加氢脱氮产品[39]

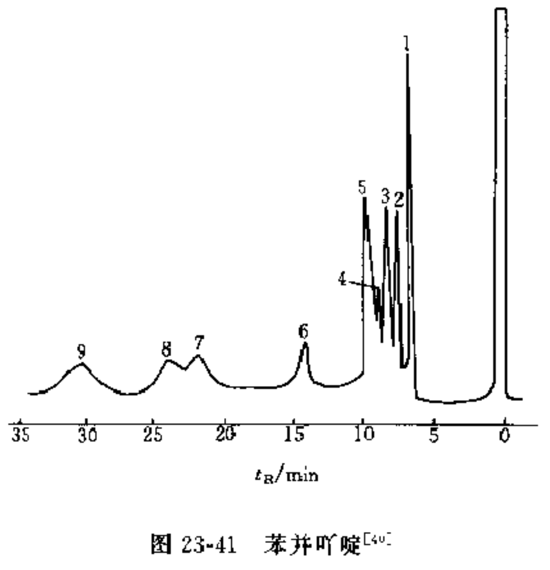


图 23-41　苯并吖啶[40]

色谱峰：1—苯并[c]吖啶；2—苯并[a]吖啶；3，4—7-甲基苯并[c]吖啶；5—5，7-二甲基苯并[a]吖啶；6—二苯并[ac]吖啶；7—二苯并[aj]吖啶；8—二苯并[ah]吖啶；9—二苯并[ai]吖啶

色谱柱：N，N'-双甲氧亚苄基-α，α'-对甲苯胺，Chromosorb W AW-DMCS(100目～120目)，1.4m×2mm

柱　温：190℃～265℃，6℃·min^{-1}

载　气：N_2，40ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：260℃

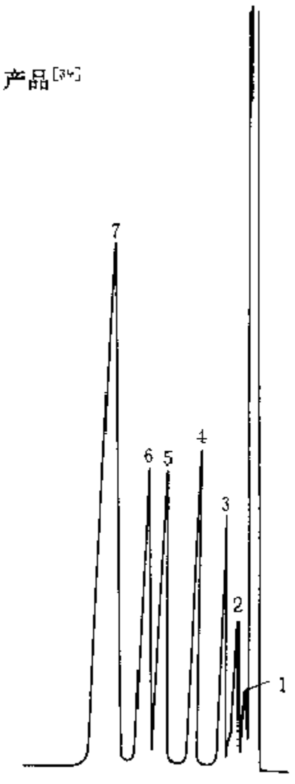


图 23-42　磷胺原油[41]

色谱峰：1—乙酰乙酰二乙胺；2—一氯代乙酰乙酰二乙胺；3—二氯代乙酰乙酰二乙胺；4—磷酸三丁酯(内标)；5—脱氯磷胺；6—α-磷胺；7—β-磷胺

色谱柱：10% SE-30，上海试剂厂101硅烷化担体(60目～80目)，2m×3mm

柱　温：200℃　　检测器：TCD

载　气：H_2，17ml·min^{-1}　　气化室温度：220℃

参 考 文 献

1 HG 2031－91
2 Dimov N, Boneva S. Chromatographia. 1982; 15: 514
3 Fear D L, Burent G. J Chromatogr, 1965; 19: 17
4 GB 9335—88. 中国国家标准汇编, 1992; 111: 25
5 Hartung A, Kraft J, Schulze J, et al. Chromatographia. 1984; 19: 269
6 Robbat A, Corso N P, Doherty P J, et al. Anal Chem 1986; 58: 2072
7 GB 9010－88. 中国国家标准汇编, 1992; 105: 726
8 Heyns K, Stute R, Winkler J. J Chromatogr, 1966; 21: 302
9 Bruner F, Ciccioli P, Brancaleoni E, et al. Chromatographia. 1975; 8: 503
10 Chrompack. The Chrompack General Catalog, 1994: 75
11 Supelco. Chromatography Products 1994, 1994: 703
12 Applied Science Europe B V Catalog 22: 37
13 Bruner F, Lattanzi L, Mangani F, et al. Chromatographia, 1994; 38: 104
14 J&W Scientific. 1994-1995 Chromatography Catalog & Reference Guide, 1995; 183
15 Ogden M W, McNair H M. HRC&CC, 1985; 8: 326
16 康新武. 色谱, 1992; 10: 176
17 Chrompack News 1984; 11(4): 2
18 Funasaka W, Kojima T, Igaki H. Anal Chem. 1964; 36: 2214
19 Henkel H G. J Gas Chrom. 1965; 2: 320
20 Rijks J A, Cramers C A, Bocak P. Chromatographia. 1975; 8: 482
21 罗春荣, 林炳承, 李浩春等. 色谱. 1987; 5: 168
22 SGE. Analytical Products 1993/1994 catalogue, 1994: 74
23 Saha N C, Jain S K, Dua R K. Chromatographia. 1977; 10: 368
24 Borwitzky H. Chromatographia. 1986; 22: 65
25 陈祖辉. 分析化学. 1981; 9: 631
26 J Chrom Sci. 1993; 31: 387
27 Treybig D S. J Chrom Sci. 1983; 21: 310
28 修振佳, 张桐风, 罗春荣等. 第十次全国色谱学术报告会文集. 1995; 95
29 于桂霞, 陈红军. 色谱. 1994; 12: 76
30 姜瑞芳、金秉珍. 第一次全国石油化工色谱学术报告会文集. 1984; 630
31 GB 6015—85. 中国国家标准汇编. 1990; 66: 342
32 De Zeeuw J, de Nijs R C M. Chrompack News. 1984; 11(2): 4
33 GB 4322—84. 中国国家标准汇编, 1990; 41: 136
34 Cieplinski E W. Anal Chem. 1966; 38: 928
35 Heyns K, Stute R, Winkler J. J Chromatogr. 1966; 21: 302
36 孙传经, 董福英. 全国第二届毛细管色谱报告会文集, 1984: 367
37 黄新芬, 张庆恩, 程桂珍. 色谱, 1985; 2: 129
38 Burchill P, Herod A A, Mitchell C A. Chromatographia. 1986; 21: 67
39 任守宪, 胡盖之, 王祖侗等. 色谱, 1985; 2: 194
40 Paller M, Hlozer V. J Chromatogr, 1976; 128: 164
41 GB 4651－84. 中国国家标准汇编, 1989; 45: 453

（李浩春　李全洪）

第二十四章　含硫化合物色谱图

第一节　无机硫化合物色谱图

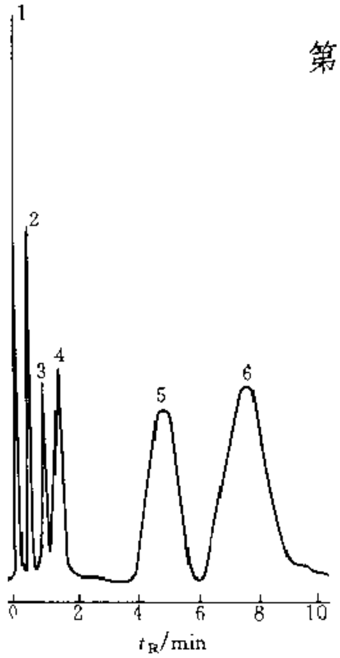


图 24-1　部分硫化物（一）[1]

色谱峰：1—空气；2—CO_2；3—COS；4—H_2S；5—CS_2；6—SO_2

色谱柱：硅胶，0.31m

柱　温：100℃

载　气：He，40ml·min^{-1}

检测器：TCD

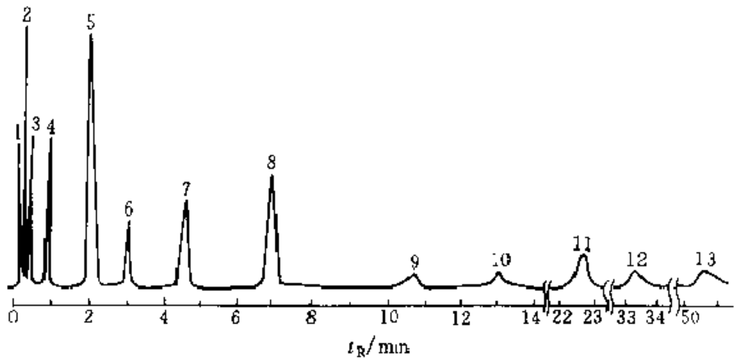


图 24-2　部分硫化物（二）[3]

色谱峰：1—H_2；2—O_2+Ar+N_2+CO；3—NO；4—CH_4；5—CO_2；6—N_2O；7—C_2H_4；8—C_2H_6；9—H_2S；10—H_2O；11—COS；12—HCN；13—SO_2

色谱柱：Porapak Q，1.83m×2.5mm+Porapak R，0.051m×2.5mm

柱　温：25℃

载　气：He，40ml·min^{-1}

检测器：TCD

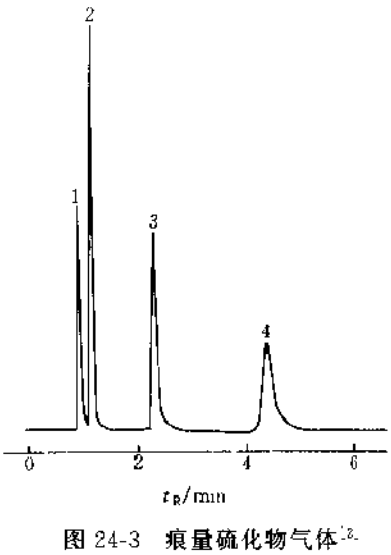


图 24-3　痕量硫化物气体[2]

色谱峰：1—COS；2—H_2S；3—CS_2；4—SO_2

色谱柱：Chromosil 310，1.82m×3mm 聚四氟乙烯管

柱　温：50℃

载　气：N_2，20ml·min^{-1}

检测器：FPD

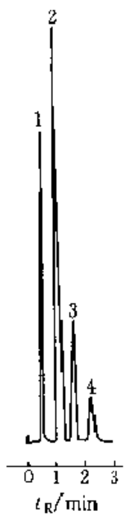


图 24-4　气体硫化物[6]

色谱峰：1—H_2S；2—COS；3—SO_2；4—甲硫醇

色谱柱：Carbograph I SC（40 目～60 目），2m×2mm

柱　温：35℃

载　气：N_2，20ml·min^{-1}

检测器：FID

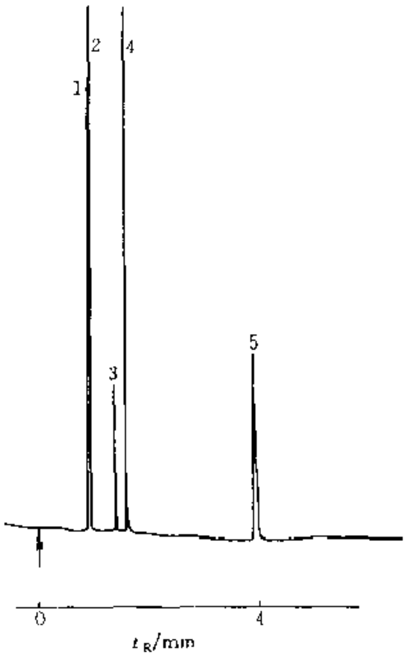


图 24-5　硫化氢（一）[4]

色谱峰：1—He；2—CO；3—CO_2；4—N_2O；5—H_2S
色谱柱：PoraPLOT Q，25m×0.32mm
柱　温：30℃
载　气：H_2
检测器：微型 TCD

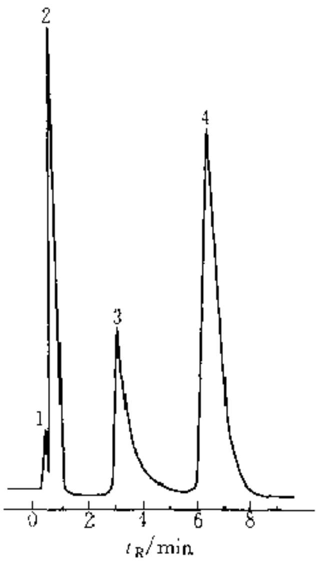
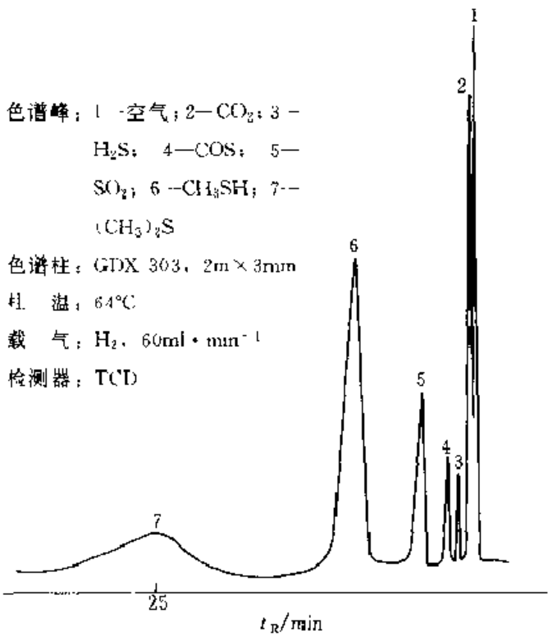


图 24-6　硫化氢（二）[5]

色谱峰：1—空气；2—H_2S；3—HCl；4—H_2O
色谱柱：5% Carbowax 20M，Fluoropak 80，2.5m×6mm
柱　温：90℃
载　气：He，33ml·min^{-1}
检测器：TCD

第二节　有机硫化合物色谱图



色谱峰：1—空气；2—CO_2；3—H_2S；4—COS；5—SO_2；6—CH_3SH；7—$(CH_3)_2S$
色谱柱：GDX 303，2m×3mm
柱　温：64℃
载　气：H_2，60ml·min^{-1}
检测器：TCD

图 24-7　低沸点硫化合物（一）[2]

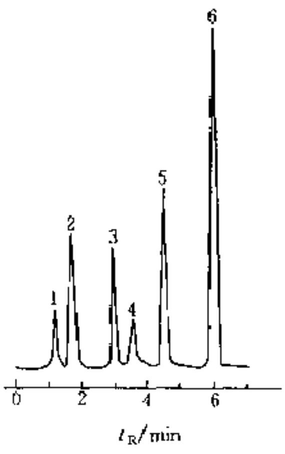


图 24-8　低沸点硫化合物（二）[3]

色谱峰：1—H_2S；2—COS；3—SO_2；4—CH_3SH；5—$(CH_3)_2S$；6—$(CH_3)_2S_2$
色谱柱：Supelpak-S，0.46m×3mm
柱　温：30℃（1min）→210℃，40℃·min^{-1}
载　气：He，30ml·min^{-1}　检测器：FPD

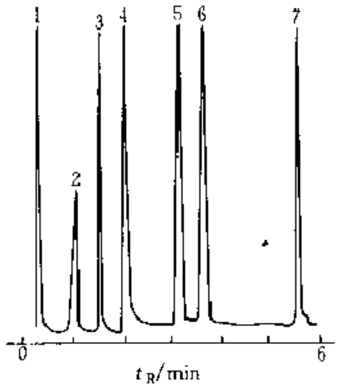


图 24-9　低沸点硫化合物（三）[11]

色谱峰：1—COS；2—H_2S；3—SO_2；4—CH_3SH；5—CS_2；6—$(CH_3)_2S$；7—$(CH_3)_2S_2$

色谱柱：PoraPLOT U，10m×0.53mm，d_f=20μm

柱　温：80℃（2min）→180℃（1min），30℃・min^{-1}

载　气：He

检测器：硫化学发光检测器

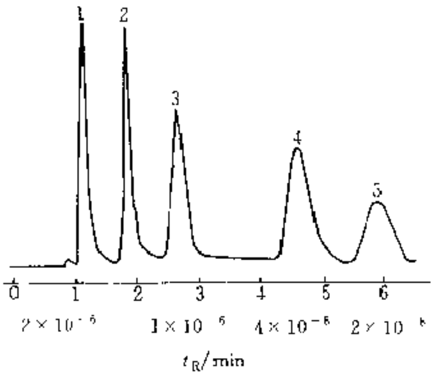


图 24-10　低沸点硫化合物（四）[12]

色谱峰：1—H_2S；2—SO_2；3—CH_3SH；4—C_2H_5SH；5—$(CH_3)_2S$

色谱柱：12%聚苯基醚－0.5%H_3PO_4，Chromosorb T（40 目～60 目），10.97m×2mm 聚四氟乙烯管

柱　温：50℃

载　气：N_2，100ml・min^{-1}

检测器：FPD

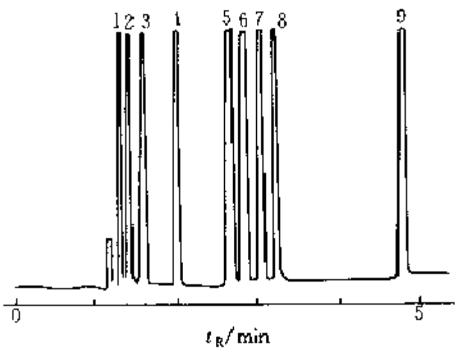


图 24-11　低沸点硫化合物（五）[12]

色谱峰：1—H_2S；2—COS；3—SO_2；4—CH_3SH；5—C_2H_5SH；6—$(CH_3)_2S$；7—CS_2；8—$(CH_3)_2CHSH$；9—$(CH_3)_2S_2$

色谱柱：DB-1，30m×0.53mm，d_f=5μm 柱与 DB-Wax，3m×0.53mm，d_f=1μm 柱串联

柱　温：30℃（1.2min）→140℃，30℃・min^{-1}

载　气：He

检测器：FPD

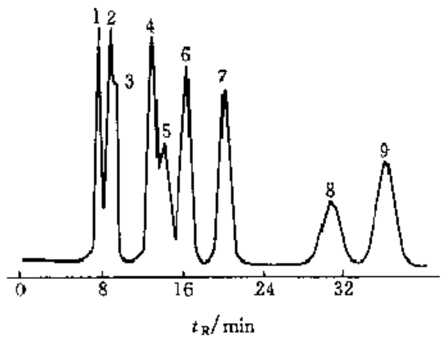


图 24-12　烃基硫化合物[13]

色谱峰：1—乙基异丙基硫；2—甲基异丁基硫；3—甲基仲丁基硫＋二异丙基硫；4—丙基异丙基硫；5—甲基丁基硫＋乙基仲丁基硫；6—异丙基异丁基硫；7—二丙基硫＋乙基丁基硫；8—异丁基仲丁基硫；9—丙基丁基硫

色谱柱：20% 7,8-苯并喹啉，硅藻土（50 目～60 目），1.25m×4mm

柱　温：100℃

载　气：N_2，25ml・min^{-1}

检测器：TCD

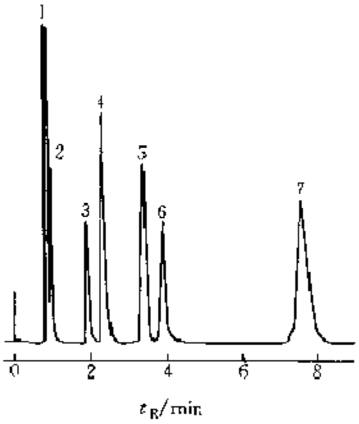


图 24-13 痕量硫醇[10]

色谱峰：1—COS；2—H_2S；3—甲硫醇；4—CS_2；5—乙硫醇；6—SO_2；7—丙硫醇
色谱柱：Chromosil 330，1.82m×3mm 聚四氟乙烯管
柱　温：40℃
载　气：N_2，20ml·min^{-1}
检测器：TCD

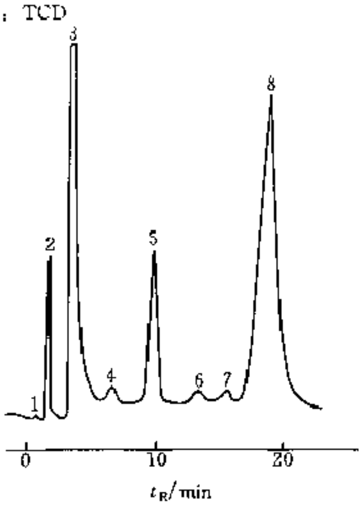


图 24-15 甲烷中硫化物[15]

色谱峰：1—甲烷；2—二氧化碳；3—硫化氢；4—甲硫醇；5—二甲硫醚；6—异丙基硫醇；7—正丙基硫醇；8—叔丁基硫醇
色谱柱：Porapak QS（80 目～100 目），0.93m×6mm
柱　温：70℃→150℃，10℃·min^{-1}
载　气：N_2，30ml·min^{-1}
检测器：电导检测器

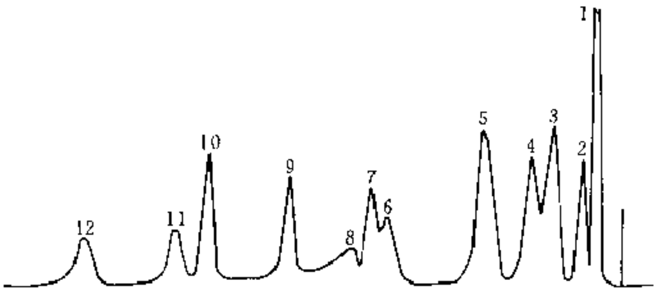


图 24-14 硫醇[14]

色谱峰：1—空气；2—硫化氢；3—异戊烷；4—正戊烷；5—甲硫醇；6—乙硫醇；7—二甲硫；8—水；9—丙硫醇；10—二乙硫；11—噻吩；12—二甲二硫化合物
色谱柱：33%磷酸三甲苯酯，Celite 545，1.22m×5mm
柱　温：70℃
载　气：He
检测器：TCD

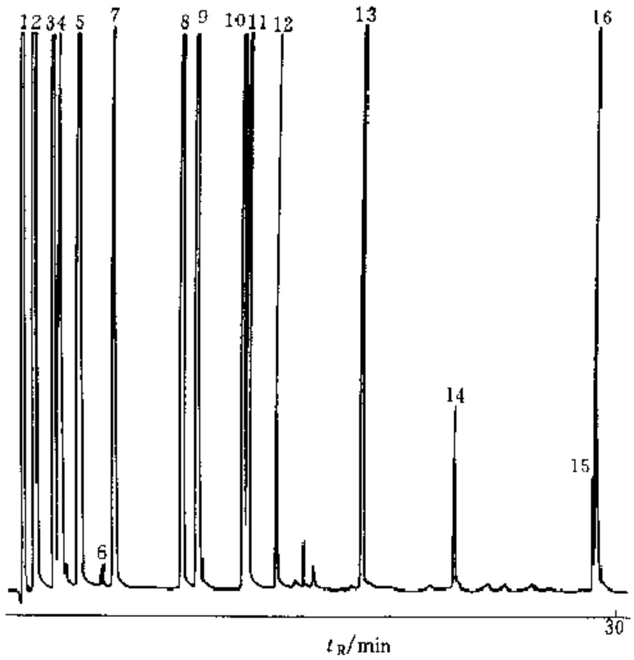


图 24-16 天然气中硫化物[16]

色谱峰：1—硫化氢；2—甲硫醇；3—乙硫醇；4—二甲硫；5—异丙基硫醇；6—叔丁基硫醇；7—正丙基硫醇；8—噻吩+仲丁基硫醇；9—异丁基硫醇；10—正丁基硫醇；11—叔戊基硫醇；12—异戊基硫醇；13—正戊基硫醇；14—正己基硫醇；15—叔-二丁基二硫化物；16—正辛基硫醇
色谱柱：甲基硅氧烷，50m×0.2mm
柱　温：35℃（10min）→300℃，7℃·min^{-1}
载　气：He
检测器：FID

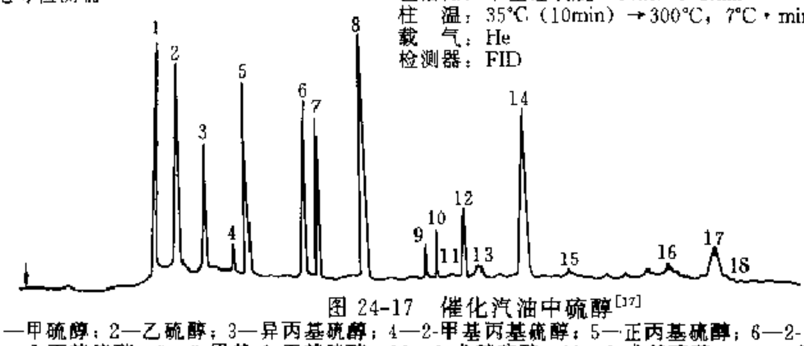
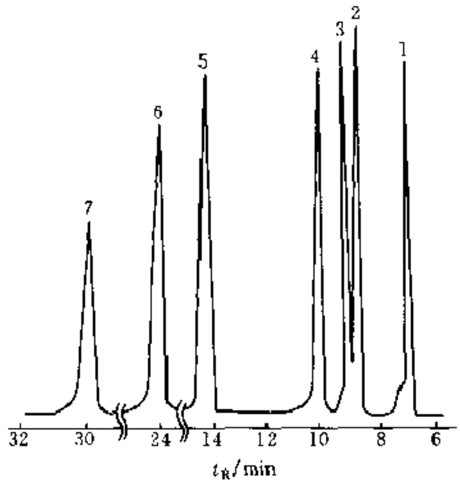


图 24-17 催化汽油中硫醇[17]

色谱峰：1—甲硫醇；2—乙硫醇；3—异丙基硫醇；4—2-甲基丙基硫醇；5—正丙基硫醇；6—2-丁基硫醇；7—异丁基硫醇；8—正丁基硫醇；9—3-甲基-2-丁基硫醇；10—2-戊基硫醇；11—3-戊基硫醇；12—3-甲基-1-丁基硫醇；13—2-甲基丁基-1-硫醇；14—正戊基硫醇；15—环戊硫醇；16—4-甲基-1-戊基硫醇；17—正己基硫醇；18—二乙基二硫化物
色谱柱：OV-101 PLOT 柱，30m×0.3mm　　检测器：FPD
柱　温：50℃→120℃，3℃·min^{-1}



色谱峰：1—甲硫醇；2—乙硫醇；3- 甲基硫醚；4—2-丙硫醇；5—乙基甲基硫醚；6--乙基硫醚；7- 正丁基硫醇

色谱柱：10% Triton X-100+1.5% Span 80；93m×0.5mm

柱　温：35℃

载　气：He，5ml·min^{-1}

检测器：FID

图 24-18　硫醚[18]

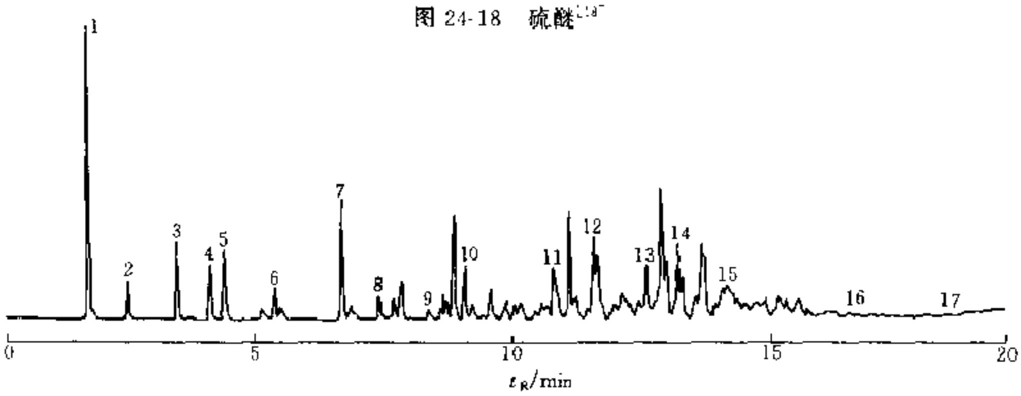


图 24-19　石脑油原油中痕量硫化物[19]

色谱峰：1 H_2S；2—CH_3SH；3— CH_3—CH_2SH ；4- CS_2；5—2-丙烷硫赶；6—甲基乙基硫醚；7—噻吩；8—二乙基硫醚；9 $(CH_3)_2S_2$；10— 3-甲基噻吩；11—2 乙基噻吩；12—二正丙硫；13…二乙基二硫化物；14—苯硫赶；15 · 1 丙基二硫化物；16— 正丙基二硫化物；17—苯并噻吩

色谱柱：SPB 1，30m×0.32mm，d_f=3μm　　　载　气：He

柱　温：35℃（1min）→300℃，10℃·min^{-1}　　　检测器：硫检测器 SCD

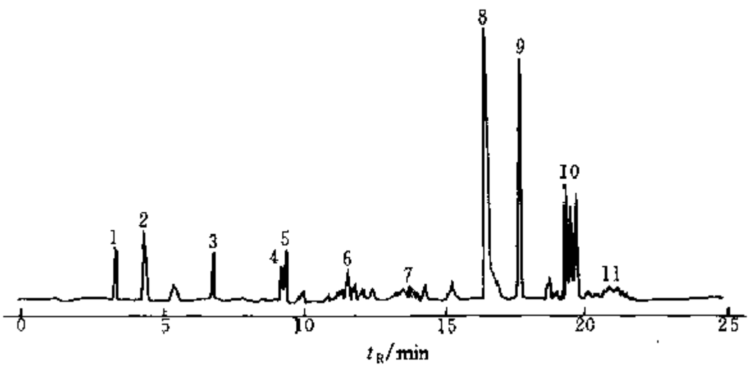


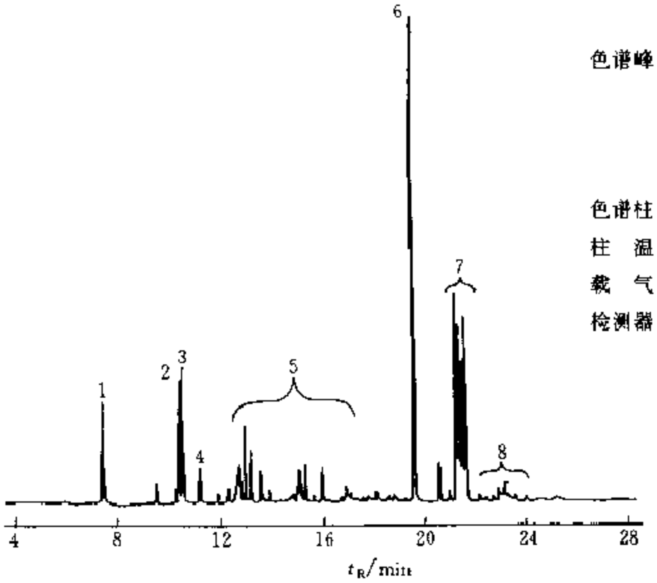
图 24-20　重整汽油中硫化物[5]

色谱峰：1—乙烷噻吩；2—2-丙烷噻吩；3—噻吩；4—2-甲基噻吩；5—3-甲基噻吩；6- ·二甲基噻吩；7- 三甲基噻吩；8—二叔丁基二硫化物；9—苯并噻吩；10- 甲基苯并噻吩；11—二甲基苯并噻吩

色谱柱：AT-Sulfur，30m×0.32mm，d_f=4.0μm

柱　温：35℃（1min）→300℃，10℃·min^{-1}

载　气：He，4ml·min^{-1}



色谱峰：1—噻吩；2—2-甲基噻吩；3—3-甲基噻吩；4—2-乙基噻吩；5—烷基噻吩；6—苯并噻吩；7—甲基苯并噻吩；8—二甲基苯并噻吩

色谱柱：Rt$_x$-1，30m×0.32mm，d_f=4.0μm

柱　温：40℃（3min）→275℃，10℃·min^{-1}

载　气：He，2.5ml·min^{-1}

检测器：硫化学发光检测器（SCD）

图 24-21　汽油中痕量硫化物[21]

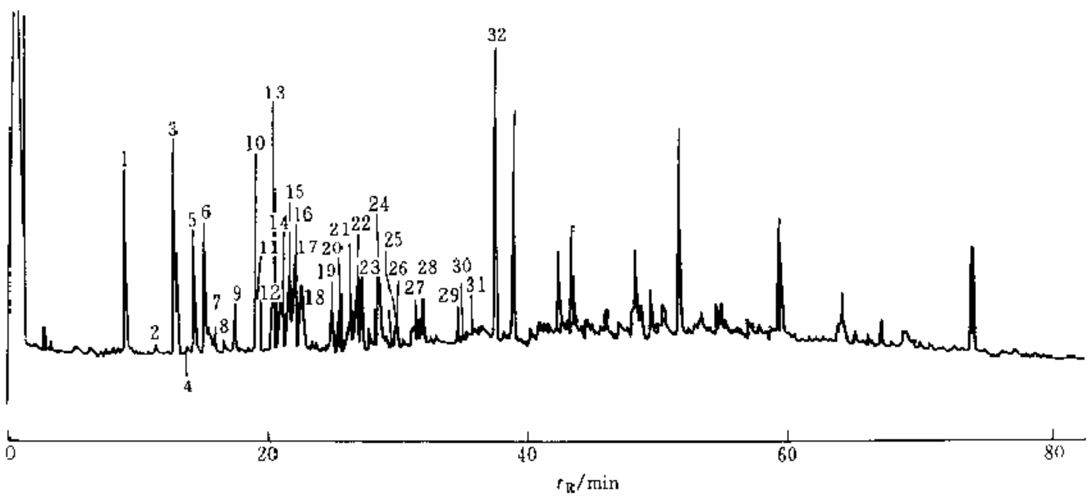
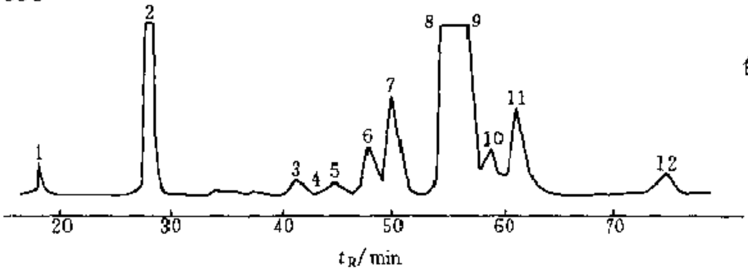


图 24-22　页岩油中含硫杂环化合物[22]

色谱峰：1—苯并[*b*]噻吩；2—3-甲基苯并[*b*]噻吩；3—5-乙基苯并[*b*]噻吩；4—反-1,2,3,4*a*，9*a*-六羟基二苯并噻吩；5—顺-1,2,3,4*a*，9*a*-六羟基二苯并噻吩；6—萘并[1,2-*b*]噻吩；7—二苯并噻吩；8—萘并[2,1-*b*]噻吩；9—萘并[2,3-*b*]噻吩；10—苯并[*b*]萘并[2,3-*d*]噻吩；11—苯并[*b*]萘并[2,1-*d*]噻吩；12—菲并[9,10-*b*]噻吩；13—菲并[4,3-*b*]噻吩；14—菲并[1,2-*b*]噻吩；15—菲并[3,4-*b*]噻吩；16—菲并[2,1-*b*]噻吩；17—菲并[3,2-*b*]噻吩；18—菲并[2,3-*b*]噻吩；19—2-（2′-萘基）苯并[*b*]噻吩；20—三亚苯并[4,5-*bcd*]噻吩；21—二萘并[2,1-*b*：1′,2′-*d*]噻吩；22—二萘并[1,2-*b*：2′,1′-*d*]噻吩；23—苯并[*b*]菲并[9,10-*d*]噻吩；24—苯并[*b*]菲并[3,4-*d*]噻吩；25—蒽并[1,2-*b*]苯并[*d*]噻吩；26—苯并[*b*]菲并[2,1-*d*]噻吩；27—9,13-1-1-三亚苯并[2,3-*b*]噻吩；28—二萘并[1,2-*b*：2′,3′-*d*]噻吩；29—苯并[*b*]菲并[3,2-*d*]噻吩；30—苯并[*b*]菲并[2,3-*d*]噻吩；31—二萘并[2,3-*b*：2′,3′-*d*]噻吩；32—三亚苯并[2,3-*b*]噻吩

色谱柱：SE-52，15m×0.28mm

柱　温：40℃→60℃，10℃·min^{-1}→250℃，2℃·min^{-1}



色谱峰：1—苯；2—甲苯；3—乙基苯；4—对二甲苯；5—间二甲苯；6—2,5二甲基噻吩；7—2-乙基噻吩；8—邻二甲苯；9—3,4-二甲基噻吩；10—3-乙基噻吩；11—2,3-二甲基噻吩；12—3,4-二甲基噻吩

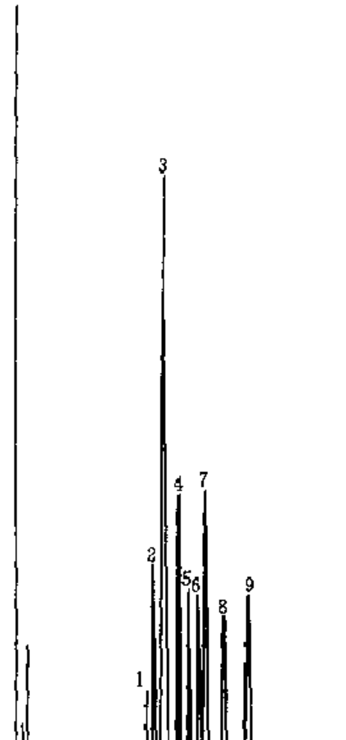
图 24-23 原油中硫化物[20]

色谱柱：16.7% Reoplex 400，GC-22 担体（30 目～42 目），12.40m×6mm

柱 温：117°C

载 气：He，60ml·min^{-1}

检测器：TCD



色谱峰：1—苯[*b*]-苯并[1,2-*d*]噻吩；2—菲并[9,10-*b*]噻吩；3—菲并[4,3-*b*]噻吩＋菲并[3,4-*b*]噻吩；4—苯[*b*]-苯并[2,1-*d*]噻吩；5—蒽并[1,2-*b*]噻吩；6—苯[*b*]萘并[2,3-*d*]噻吩；7—菲并[1,2-*b*]噻吩＋菲并[3,2-*b*]噻吩；8—蒽并[2,1-*b*]噻吩＋菲并[2,3-*b*]噻吩；9—菲并[2,1-*b*]噻吩

色谱柱：*N*，*N*'-双（对丁氧基亚苄基）-α，α'-二对甲苯胺＋SE-52，19.6m×0.32mm

柱 温：220°C

载 气：H_2，$\bar{u}$=95cm·s^{-1}

检测器：FID

图 24-24 多环芳烃硫化物[13]

参 考 文 献

1 Hodeges C T，Matson R F. Anal Chem，1965；37：1065

2 Supelco. Chromatography Products 1994，1994：726

3 Wilhite W F，Hollis O L. J Gas Chrom，1968；6：84

4 De Zeeuw J，de Nijk R C M，Buyten J C，et al. HRC&CC，1988；11：162

5 Obermiller E L，Charlier G O. Anal Chem，1967；39：336

6 Alltech. Chromatography Catalog 350，1995；14～30
7 苏天升．分析化学，1982；10：240
8 Supelco. Catalog 18：26
9 Gaines K K，Chatham W H，Farwell S O. HRC，1990；13：585
10 Supelco. Chromatography Catalog 26：51～52
11 Petranek J. J Chromatogr，1961；5：254
12 Gaines K K，Chatham W H，Farwell S O. HRC，1990；13：489
13 Kong R C，Lee M L，Tominage Y，et al. J chrom Sci，1982；20：502
14 Ryce S A，Bryce W A. Anal Chem，1957；29：925
15 Shille R G，Bronsky R B. J Chrom Sci，1977；15：541
16 Hewlett-Packard. Application Note，AN228-25
17 孙传经．第一次全国石油化工色谱学术报告会文集，1984：145
18 Freedman R W. J Gas Chrom，1968；6：495
19 J Chrom Sci，1991；29：174
20 Coleman H J，Thompson C J，Hopkins R L，et al. J Chromatogr，1966；25：34
21 J Chrom Sci. 1993；31：153
22 Willey C，Iwao M，Castle R N，et al. Anal Chem，1981；53：400

（李浩春　李全洪）

第二十五章　含卤素化合物色谱图

第一节　无机卤素化合物色谱图

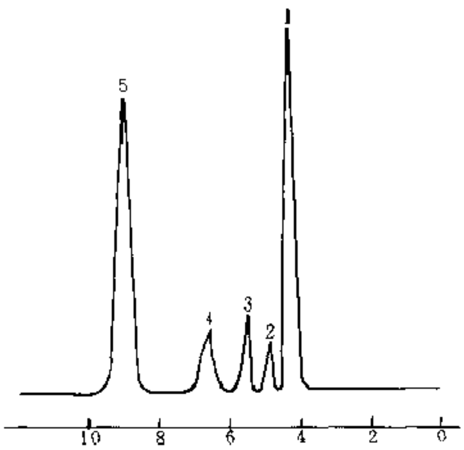


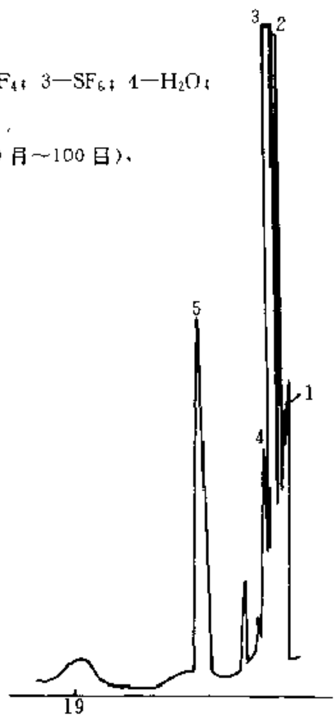
图 25-1　硫氟化合物[1]

色谱峰：1—空气；2—SF_6；3—SF_4；4—SOF_2；5—SF_5Cl

色谱柱：33% Kel-F 油 NO. 3，Chromosorb W，6m×4mm

柱　温：25℃

载　气：He，37ml・min



色谱峰：1—空气；2—CF_4；3—SF_6；4—H_2O；5—$S_2F_{10}O$

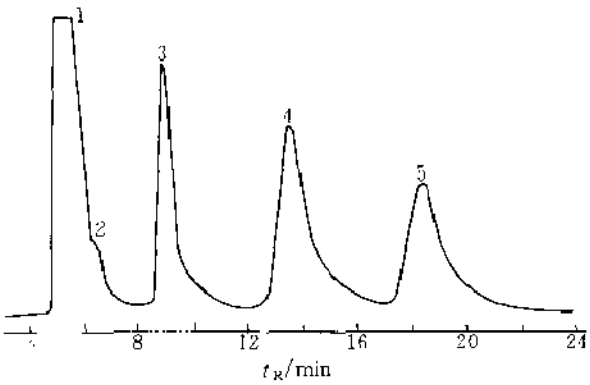
色谱柱：Porapak QS（80 目～100 目），2m×3mm

柱　温：100℃

载　气：H_2

检测器：TCD

图 25-2　六氟化硫中杂质[2]



色谱峰：1—F_2；2—SiF_4+BF_3；3—SF_6；4—SeF_6；5—TeF_6

色谱柱：15% Kel-F 10 油，Chromosorb T（40 目～60 目），6.82m×6mm

柱　温：−70℃

载　气：He，28ml・min⁻¹

检测器：TCD

图 25-3　氟化物[3]

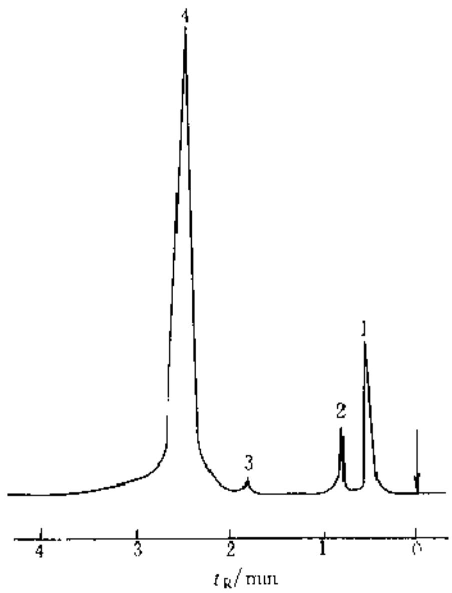


图 25-4 工业六氟化硫[3]

色谱峰：1—空气；2—CF_4；3—CO_2；4—SF_6

色谱柱：癸二酸二异辛酯+硅胶(30目～60目)质量比为3：97，2m×3mm

柱　温：室温～45°C

载　气：H_2，40ml·min^{-1}

检测器：TCD

检测器温度：室温～45°C

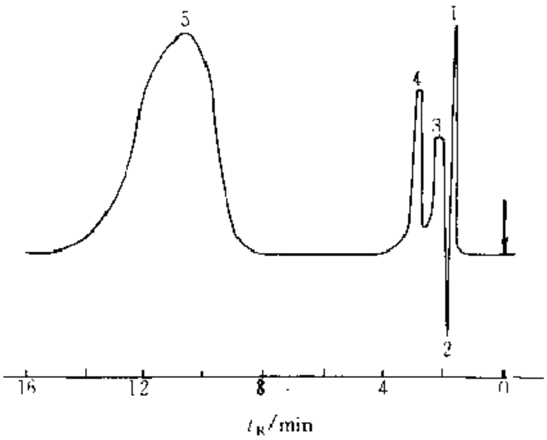


图 25-5 六氟化铀[4]

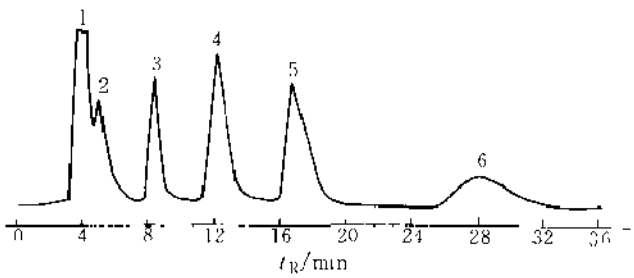
色谱峰：1—ClF；2—HF；3—Cl_2；4—ClF_3；5—UF_6

色谱柱：33% Kel-F 10油，聚四氟乙烯（30目～60目），1.49m×8.4mm

柱　温：48°C

载　气：Ar，16.5ml·min^{-1}

检测器：气体比重秤



色谱峰：1—F_2+反应产物；2—铼中不纯物；3—WF_6；4—ReF_6；5—OsF_6；6—$ReOF_5$

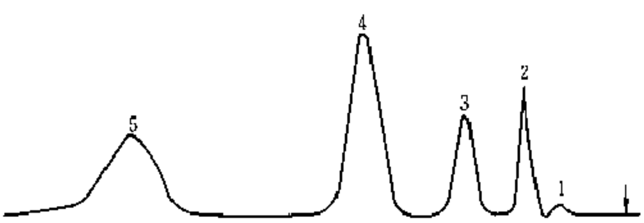
色谱柱：15% Kel-F 10油，Chromosorb T（40目～60目），6.82m×6mm

柱　温：75°C

载　气：He，28ml·min^{-1}

检测器：TCD

图 25-6 金属氟化物[5]



色谱峰：1—HCl；2—$SiCl_4$；3—$GeCl_4$；4—$SnCl_4$；5—$TiCl_4$

色谱柱：Kel-F 40油，Haloport F 担体

柱　温：75°C

载　气：N_2，40ml·min^{-1}

图 25-7 金属氯化物（一）[6]

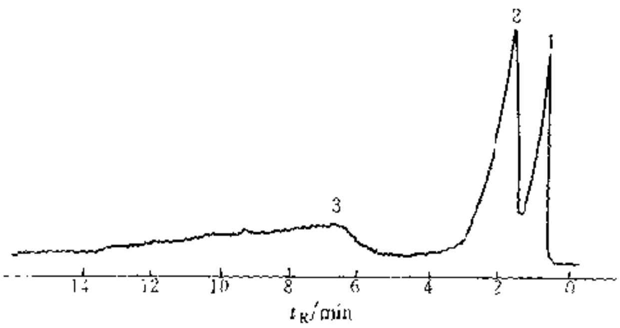


图 25-8 金属氯化物（二）[7]

色谱峰：1—$TaCl_5$；2—$NbCl_5$；3—$HfCl_4$

色谱柱：石墨化-炭黑（160μm～200μm），0.50m

柱 温：302℃

载 气：He，48℃·min^{-1}



图 25-9 氯化氢中痕量水[8]

色谱峰：1—空气；2—水（12μg/g）；3—氯化氢

色谱柱：HayeSep R（80 目～100 目），2.7m×3mm 镍管

柱 温：118℃

载 气：He，30ml·min^{-1}

检测器：TCD

第二节 有机卤素化合物色谱图

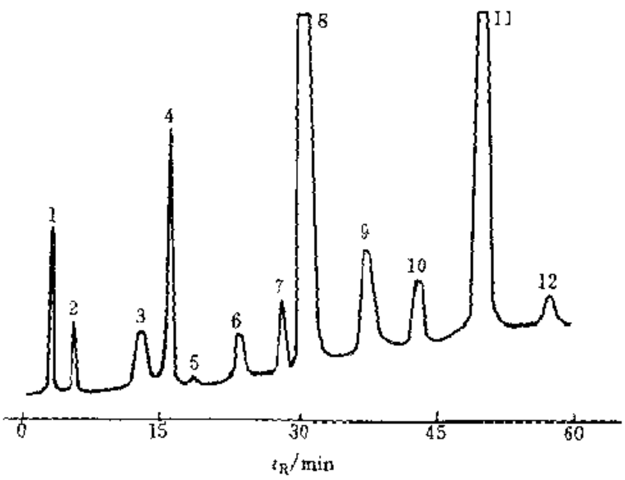


图 25-10 氟代烃[9]

色谱峰：1—空气；2—CF_4；3—C_2F_6；4—C_2F_4；5—C_2F_2；6—C_3F_6；7—*cyclo*-C_3F_6；8—*n*-C_3F_8；9—*cyclo*-C_4F_8；10—*cis*-2-C_4F_8+*trans*-2-C_4F_8；11—*n*-C_4H_9；12—1-C_4H_8

色谱柱：硅胶（50 目～80 目），3.05m×6mm

柱 温：室温～180℃，60min

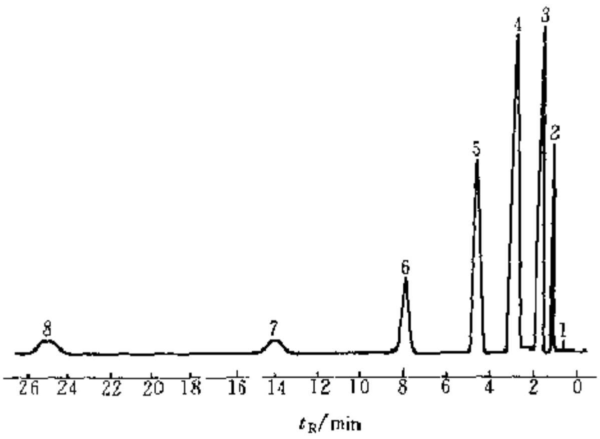


图 25-11　含碘的氟碳同系物[11]

色谱峰：1—空气；2—$(CF_3)_2CF(CF_2CF_2)_3I$；3—$(CF_3)_2CF(CF_2CF_2)_5I$；4—$(CF_3)_2CF(CF_2CF_2)_7I$；5—$(CF_3)_2CF(CF_2CF_2)_9I$；6—$(CF_3)_2CF(CF_2CF_2)_{11}I$；7—$(CF_3)_2CF(CF_2CF_2)_{13}I$；8—$(CF_3)_2CF(CF_2CF_2)_{15}I$

色谱柱：20% OV 17，Chromosorb P AW DMCS（80 目～100 目），2m×3mm

柱　温：110°C

载　气：H_2，25ml・min^{-1}　　　　气化室温度：180°C

检测器：TCD　　　　检测器温度：110°C

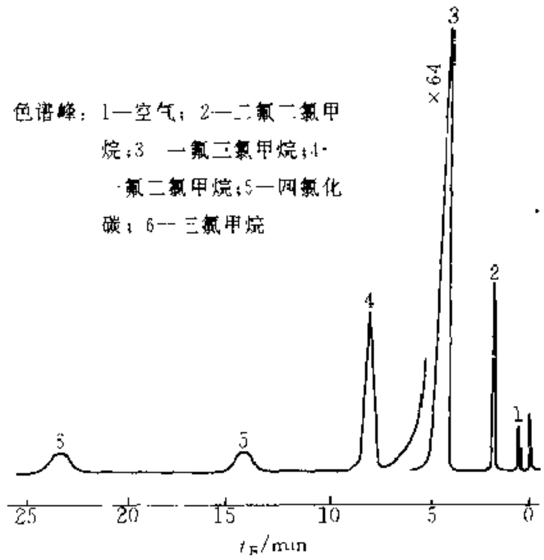


图 25-12　一氟三氯甲烷[11]

色谱柱：5% β，β′-氧二丙腈，上海试剂厂硅胶（80 目～100 目），2m×3mm

柱　温：50°C

载　气：H_2，63ml・min^{-1}　　气化室温度：100°C

检测器：TCD　　检测器温度：100°C

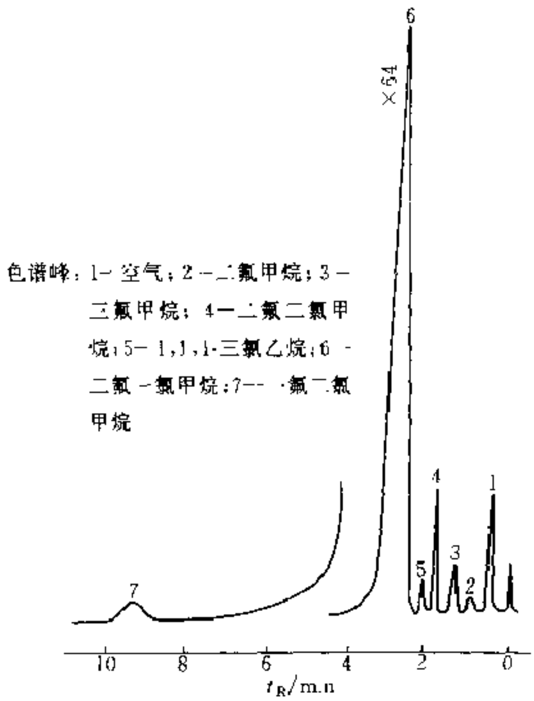


图 25-13　二氟一氯甲烷[12]

色谱柱：5% β，β′-氧二丙腈、上海试剂厂硅胶（80 目～100 目），2m×3mm

柱　温：50°C

载　气：H_2、50ml・min^{-1}　　气化室温度：70°C

检测器：TCD　　检测器温度：50°C

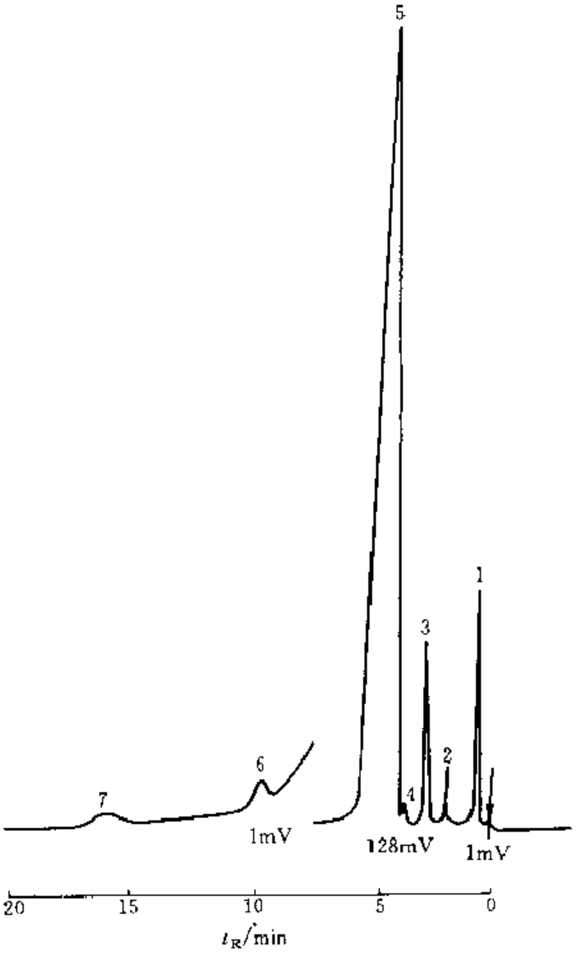


图 25-14　二氟一氯甲烷[13]

色谱峰：1—空气；2—三氟甲烷；3—二氟二氯甲烷；4—1,1,1-三氟乙烷；5—二氟一氯甲烷；6—1,1-二氟乙烷；7—一氟二氯甲烷

色谱柱：5% β,β'-氧二丙腈，硅胶（80 目～100 目），2m×3mm

柱　温：50℃

载　气：H_2，52ml·min^{-1}

检测器：TCD

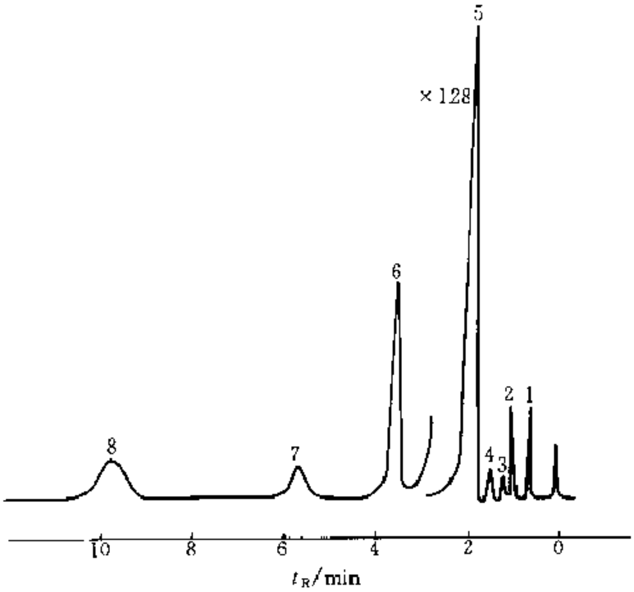


图 25-15　二氟二氯甲烷[12]

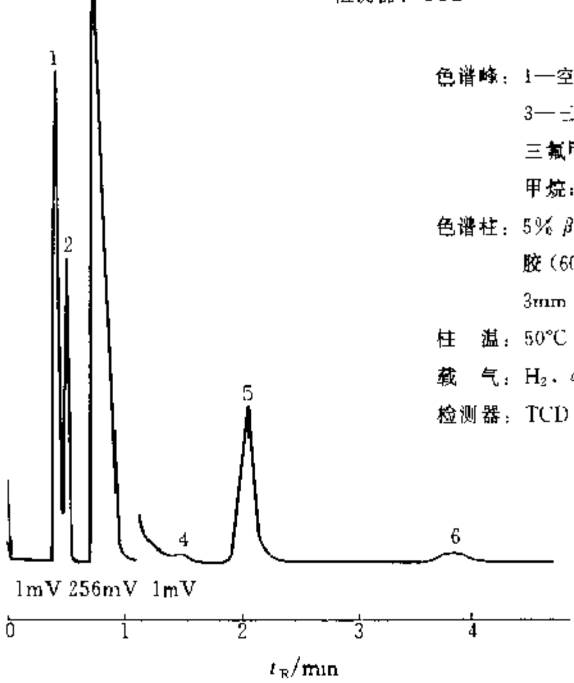
色谱峰：1—空气；2—三氟一氯甲烷；3—二氧化碳；4—二氟甲烷；5—二氟二氯甲烷；6—二氟一氯甲烷；7—一氟三氯甲烷；8—一氟二氯甲烷

色谱柱：5% β,β'-氧二丙腈，上海试剂厂硅胶（80 目～100 目），2m×3mm

柱　温：50℃

载　气：H_2，50ml·min^{-1}　　气化室温度：70℃

检测器：TCD　　检测器温度：50℃



色谱峰：1—空气；2—四氟甲烷；3—三氟一氯甲烷；4—三氟甲烷；5—二氟二氯甲烷；6—二氟一氯甲烷

色谱柱：5% β,β'-氧二丙腈，硅胶（60 目～80 目），2m×3mm

柱　温：50℃

载　气：H_2，40ml·min^{-1}

检测器：TCD

图 25-16　三氟一氯甲烷[11]



图 25-17 氟利昂（一）[15]

色谱峰：1—氟利昂-11；2—氟利昂-12
色谱柱：Porapak Q（80目～100目），2m×3mm
柱 温：70℃
载 气：N_2，30ml·min^{-1}
检测器：FID
气化室温度：100℃
检测器温度：100℃

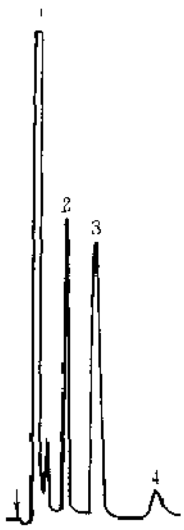


图 25-18 氟利昂（二）[15]

色谱峰：1—空气；2—乙醇；3—氟利昂-12；4—氟利昂-11
色谱柱：Porapak Q（80目～100目），2m×3mm
柱 温：130℃
载 气：He，45ml·min^{-1}
检测器：TCD
气化室温度：150℃
检测器温度：150℃



图 25-19 氟利昂（三）[16]

色谱峰：1—空气；2—水；3—氟利昂-12；4—氟利昂-114；5—氟利昂-11；6—氟利昂-113
色谱柱：Porapak Q（80目～100目），1.83m×2mm
柱 温：150℃
载 气：He，25ml·min^{-1}
检测器：TCD

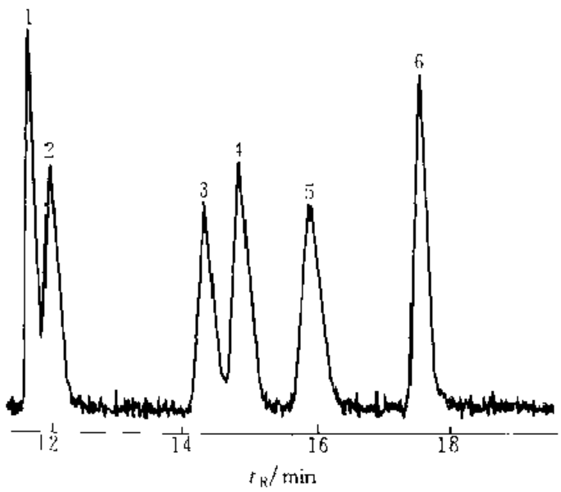


图 25-20 氟利昂（四）[17]

色谱峰：1—氟利昂-21；2—氟利昂-11；3—氟利昂-123；4—氟利昂-123a；5—氟利昂-113；6—二氯甲烷
色谱柱：Rt_x-200，105m×0.53mm，d_f=3.0μm
柱 温：35℃
载 气：He，$\bar{u}$=20cm·s^{-1}
检测器：FID

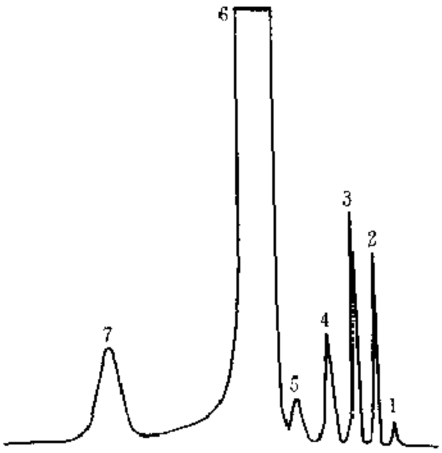


图 25-21　工业二氯甲烷[19]

色谱峰：1—空气；2—氯甲烷；3—氯乙烷；4—1,1-二氯乙烯；5—氯丙烯；6—二氯甲烷；7—三氯甲烷

色谱柱：邻苯二甲酸二丁酯＋Carbowax 20M＋6201 担体（0.20mm～0.28mm）质量比为 19∶1∶100，3m×3mm

柱　温：70℃

载　气：H_2，40ml・min^{-1}

检测器：TCD

气化室温度：100℃

检测器温度：90℃

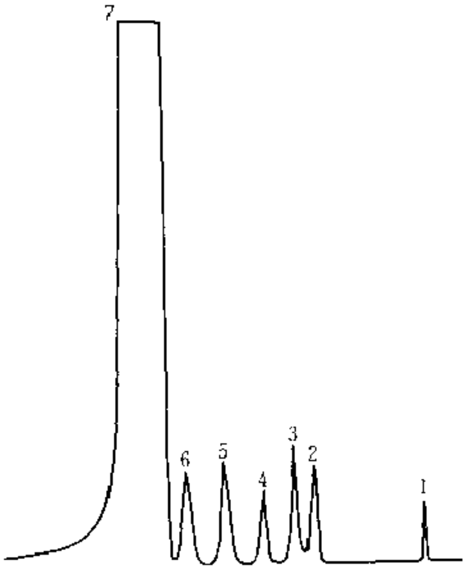


图 25-22　工业三氯甲烷[20]

色谱峰：1—空气；2—反-1,2-二氯乙烯；3—二氯甲烷；4—1,1-二氯乙烷；5—四氯化碳；6—顺-1,2-二氯乙烯；7—三氯甲烷

色谱柱：邻苯二甲酸二丁酯＋Carbowax 20M＋6201 担体（0.20mm～0.28mm）质量比为 19∶1∶100，3m×3mm

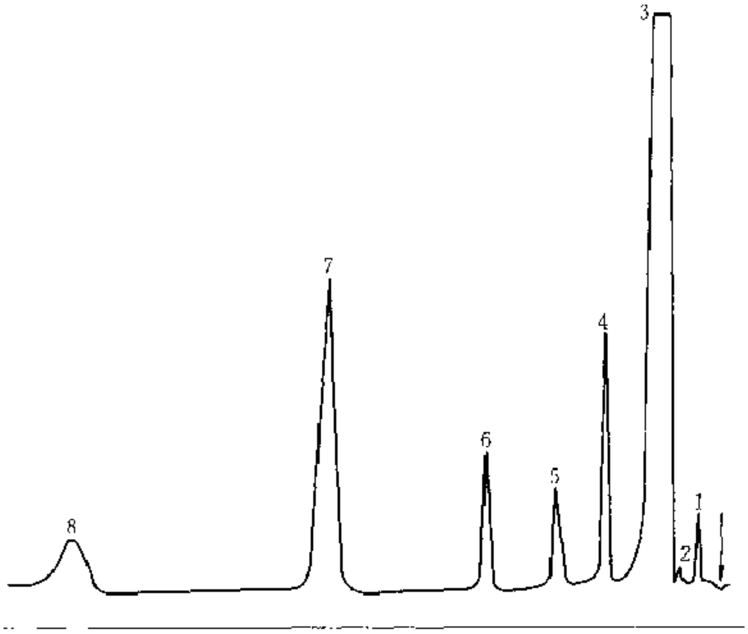
柱　温：70℃

载　气：H_2，40ml・min^{-1}

检测器：TCD

气化室温度：100℃

检测器温度：100℃



色谱峰：1—空气；2—二氯甲烷；3—三氯甲烷；4—四氯乙烯；5—1,1,2,2-四氯乙烷；6—五氯乙烷；7—六氯乙烷；8—六氯丁二烯

色谱柱：20% E-301，6201 担体（60 目～80 目），3m×3mm

柱　温：130℃

载　气：H_2，40ml・min^{-1}

检测器：TCD

气化室温度：170℃

检测器温度：170℃

图 25-23　工业六氯乙烷[21]

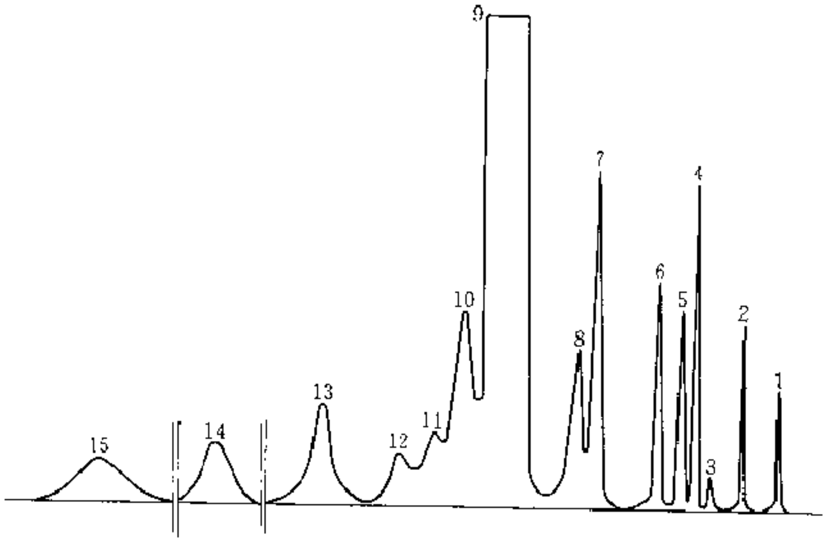


图 25-24 工业四氯乙烯[22]

色谱峰：1—空气；2—1,1-二氯乙烯；3—三氯甲烷；4—1,2-二氯乙烷；5—四氯化碳；6—三氯乙烯；7—1,1,2-三氯乙烷；8—1,3-二氯丙烷；9—四氯乙烯；10—1,1,2,2-四氯乙烷；11—1,1,2-三氯丙烯；12—3,3-二氯丙烯；13—1,1,2,2-四氯乙烷；14—五氯乙烷；15—六氯乙烷

色谱柱：20%E-301，6201担体（60目～80目），3m×3mm

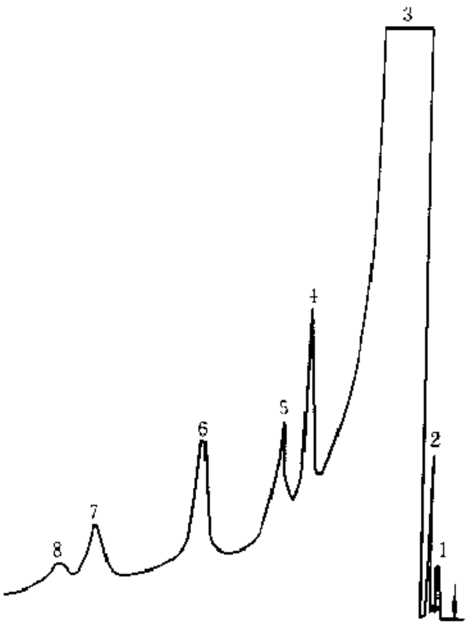
柱温：90℃

载气：H_2，50ml·min^{-1}

检测器：TCD

气化室温度：130℃

检测器温度：120℃



色谱峰：1—甲烷；2—乙炔；3—氯乙烯；4—反-1,2-二氯乙烯；5—乙醛；6—1,1-二氯乙烷；7—三氯乙烯；8—顺-1,2-二氯乙烯

色谱柱：20%β，β'-氧二丙腈，Chromosorb P（60目～80目），2.5m×4mm

柱温：30℃

载气：N_2，31ml·min^{-1}

检测器：FID

图 25-25 氯乙烯中杂质[23]

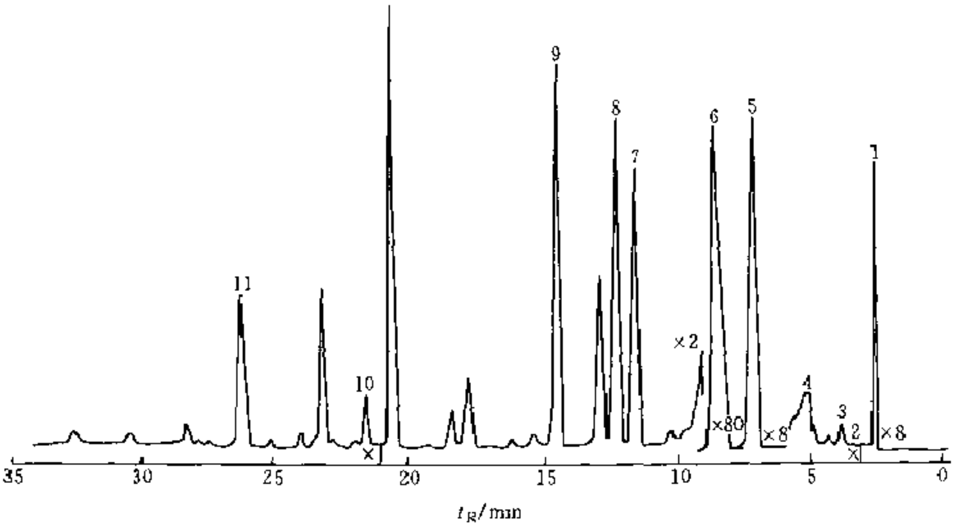


图 25-26 氯乙烯副产物[24]

色谱峰：1—氯乙烯；2—氯乙烷；3—2-氯-1-丙烯；4—1,1-二氯乙烯；5—反-1,2-二氯乙烯；6—1,1-二氯乙烷；7—三氯甲烷；8—顺-1,2-二氯乙烯；9—1,2-二氯乙烷；10—1,1,1,2-四氯乙烷；11—1,1,2,2-四氯乙烷

色谱柱：5% SP-1200+1.75% Bentone-34，Supelcoport（100 目～120 目），3.6m×3mm

柱　温：40℃（4min）→160℃，5℃·min^{-1}　　气化室温度：250℃

载　气：N_2，15ml·min^{-1}　　检测器温度：250℃

检测器：FID

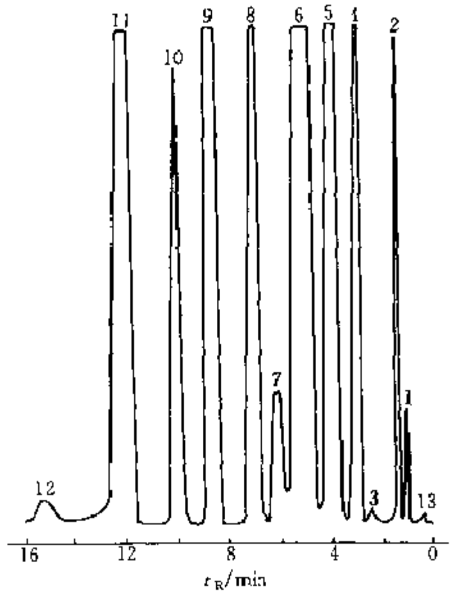


图 25-27 氯代烃（一）[25]

色谱峰：1—氯乙烯；2—氯乙烷；3—1,1-二氯乙烯；4—反-1,2-二氯乙烯；5—顺-1,2-二氯乙烯；6—1,2-二氯乙烷；7—四氯化碳；8—三氯乙烯；9—1,1,2-三氯乙烷；10—全氯乙烯；11—1,1,2,2-四氯乙烷；12—五氯乙烷；13—空气

色谱柱：15% SE-30，耐火砖（30 目～60 目），1.86m×6mm

柱　温：53℃（4min）→110℃，1℃·min^{-1}

载　气：He，90ml·min^{-1}

检测器：TCD

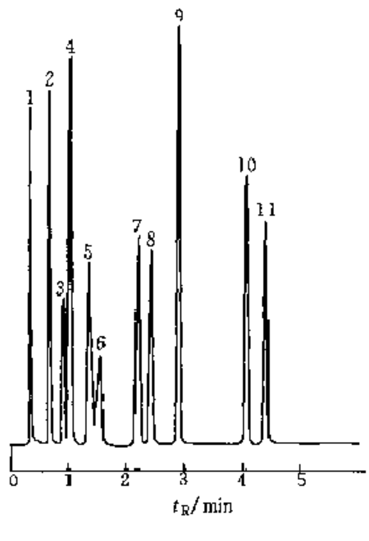


图 25-28 氯代烃（二）[26]

色谱峰：1—二氯甲烷；2—1,1-二氯乙烷；3—1,2-二氯乙烷；4—三氯甲烷；5—1,1,1-三氯乙烷；6—四氯化碳；7—1,2-二氯丙烷；8—三氯乙烯；9—1,1,2-三氯乙烷；10—全氯乙烯；11—1,1,2,2-四氯乙烷

色谱柱：0.26% SP-1000，低表面积的石墨化炭黑（80 目～100 目），2m×1.5mm

柱　温：60℃→200℃，20℃·min^{-1}

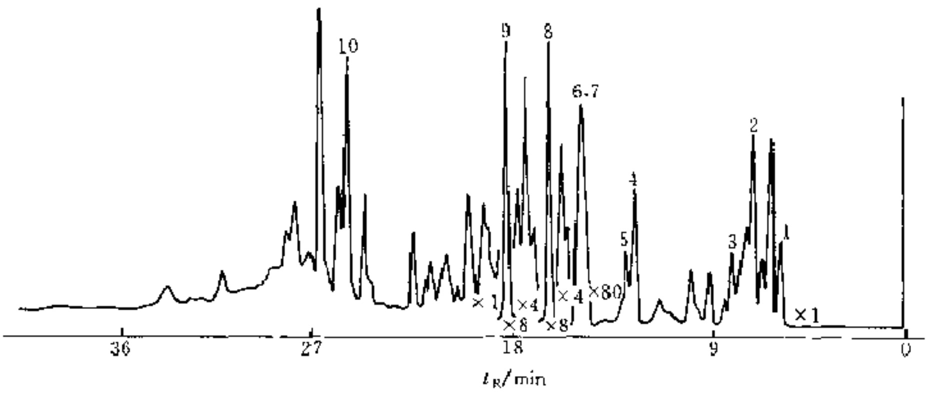


图 25-29　氯甲代氧丙环副产物[24]

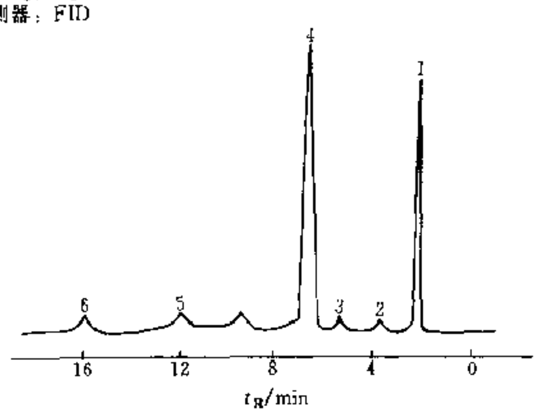
色谱峰：1—3-氯-1-丙烯；2—反-1,2-二氯乙烯；3—2,2-二氯丙烷；4—1,1-二氯-1-丙烯；5—顺-1,2-二氯乙烯；6—1,2-二氯丙烷；7—2,3-二氯-1-丙烯；8—反-1,3-二氯-1-丙烯；9—顺-1,3-二氯-1-丙烯；10—1,2,3-三氯丙烷

色谱柱：5% SP-2100+1.75% Bentone-34，Supelcoport（100 目～120 目），3.6m×3mm

柱　温：40℃（4min）→160℃，5℃·min^{-1}

载　气：N_2，15ml·min^{-1}　　　　气化室温度：250℃

检测器：FID　　　　检测器温度：250℃



色谱峰：1—四氟乙烯；2—全氟丙烷；3—全氟丙烯；4—全氟环丁烷；5—二氟一氯甲烷；6—全氟异丁烯

色谱柱：5% 十六烷，硅胶（60 目～80 目），1m×4mm

柱　温：室温

载　气：H_2，40ml·min^{-1}

检测器：FID

图 25-30　卤代烃（一）[10]

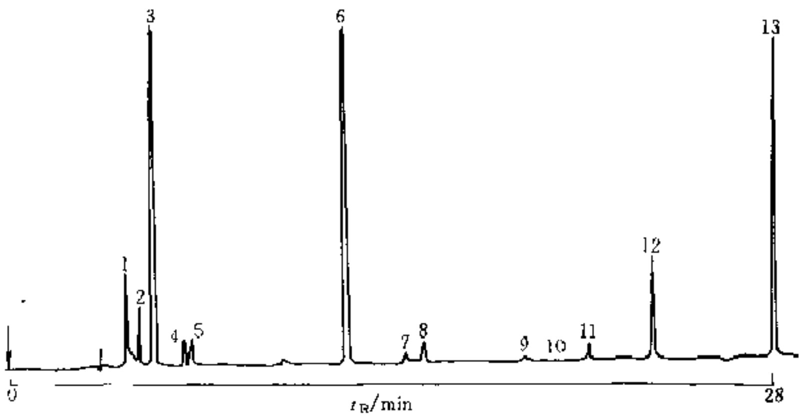


图 25-31　卤代烃（二）[8]

色谱峰：1—硫化氢；2—氟利昂-22；3—氟利昂-12；4—氯乙烯；5—氟利昂-114；6—氟利昂-11；7—二氯甲烷；8—氟利昂-113；9—1,2-二氯乙烯；10—三氯甲烷；11—1,1,1-三氯乙烷；12—三氯乙烯；13—四氯乙烯

色谱柱：CP-Sil 5 CP，25m×0.32mm，d_f=5.0μm

柱　温：30℃（5min）→105℃，5℃·min^{-1}→200℃，10℃·min^{-1}　　　　检测器：ECD

载　气：N_2，20kPa　　　　气化室温度：250℃

检测器温度：280℃

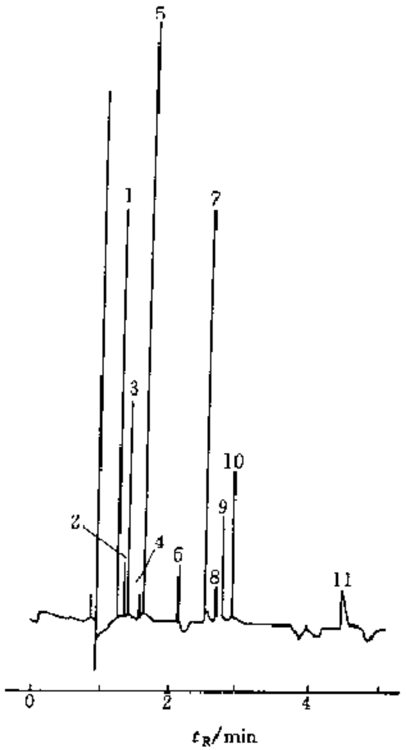


图 25-32 卤代烃（三）[27]

色谱峰：1—$CHCl_3$；2—CH_3CCl_3；3—CCl_4；4—$CHCl=CCl_2$；5—$CHBrCl_2$；6—$CBrCl_3$；7—$CHBr_2Cl$；8—$BrCH_2CH_2Br$；9—$Cl_2C=CCl_2$；10—内标物；11—$CHBr_3$

色谱柱：SE 52，20m×0.3mm

柱　温：50℃

载　气：H_2，$\bar{u}=40cm \cdot s^{-1}$

检测器：ECD

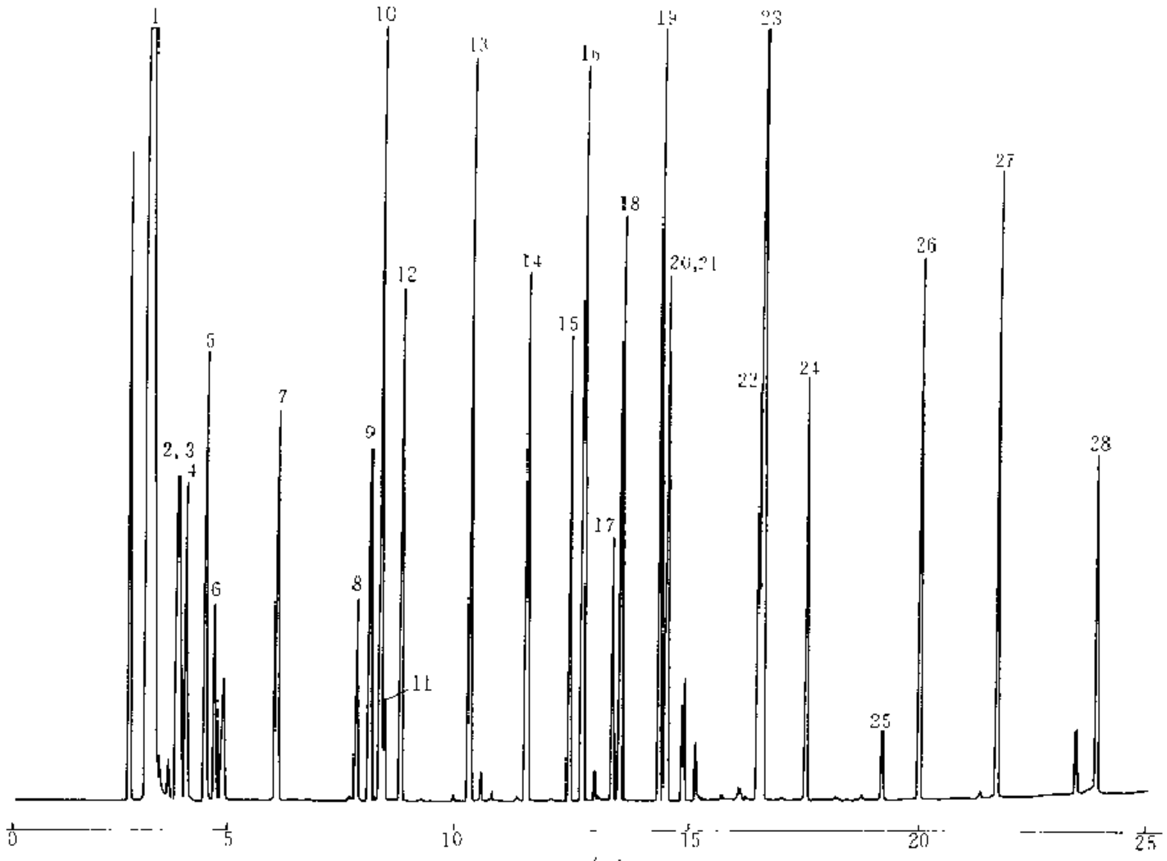


图 25-33 卤代烃（四）[28]

色谱峰：1—戊烷；2—碘甲烷；3—1,1-二氯乙烯；4—1,1,2-三氯三氟乙烷；5—3-氯丙烯；6—二氯甲烷；7—1,1-二氯乙烷；8—氯仿；9—1,1,1-三氯乙烷；10—1-氯丁烷；11—四氯化碳；12—1,2-二氯乙烷；13—1,2-二氯丙烷；14—顺-1,2-二氯丙烯；15—反-1,2-二氯丙烯；16—1,1,2-三氯乙烷；17—1,1,1,2-四氯乙烷；18—1,2-二溴乙烷；19—1-氯己烷；20—反-1,4-二氯-2-丁烯；21—碘仿；22—六氯丁二烯；23—1,2,3-三氯丙烷；24—1,1,2,2-四氯乙烷；25—五氯乙烷；26—1,2-二溴-3-氯丙烷；27—六氯乙烷；28—六氯环戊二烯

色谱柱：DB 624，30m×0.32mm，$d_f=1.8\mu m$　　检测器：FID

柱　温：35℃（5min）→245℃，10℃·min^{-1}　　气化室温度：250℃

载　气：He，35cm·s^{-1}　　检测器温度：300℃

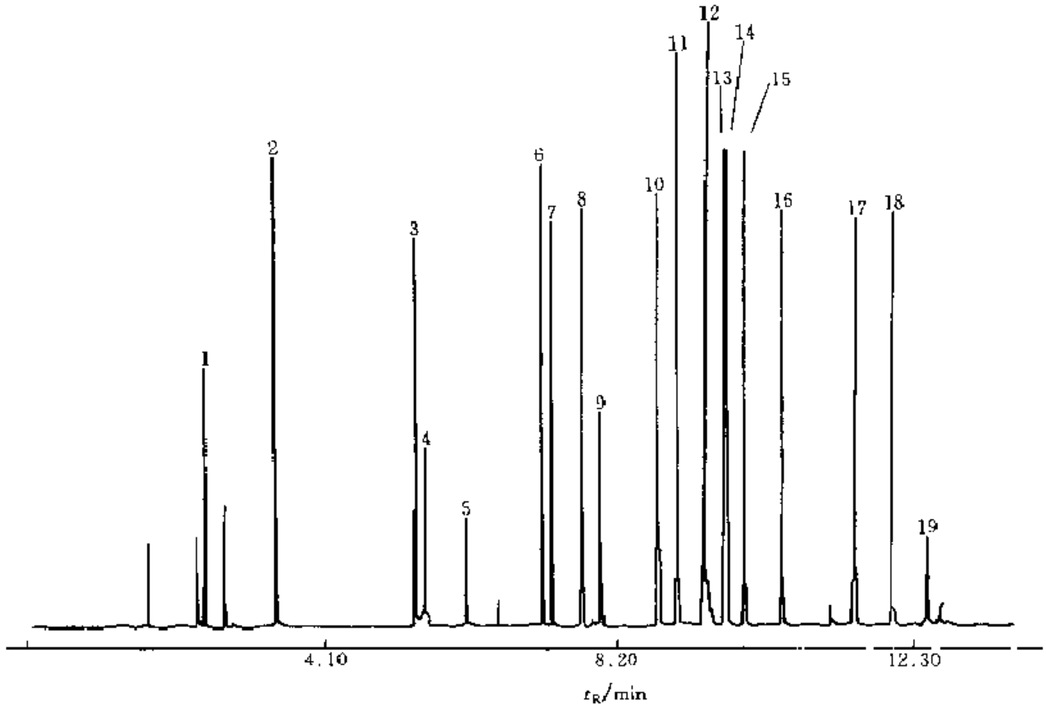


图 25-34 卤代烃（五）[23]

色谱峰：1—溴氯甲烷；2—苯；3—甲苯；4—1-氯-2-溴丙烷；5—1,2-二溴乙烷；6—乙基苯；7—间二甲苯；8—对二甲苯；9—1,4-二氯丁烷；10—正丙基苯；11—1,3,5-三甲基苯；12—叔丁基苯+1,2,4-三甲基苯；13—异丁基苯；14—仲丁基苯；15—1-异丙基-4-甲基苯；16—正丁基苯；17—1,2,3,5-四甲基苯；18—1,2,3,4-四甲基苯；19—萘

色谱柱：DB-5，30m×0.32mm，d_f=0.25μm　　检测器：MS

载　气：He

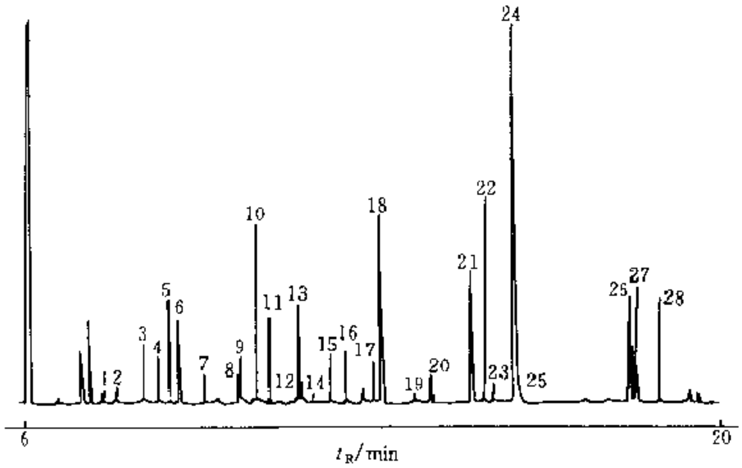


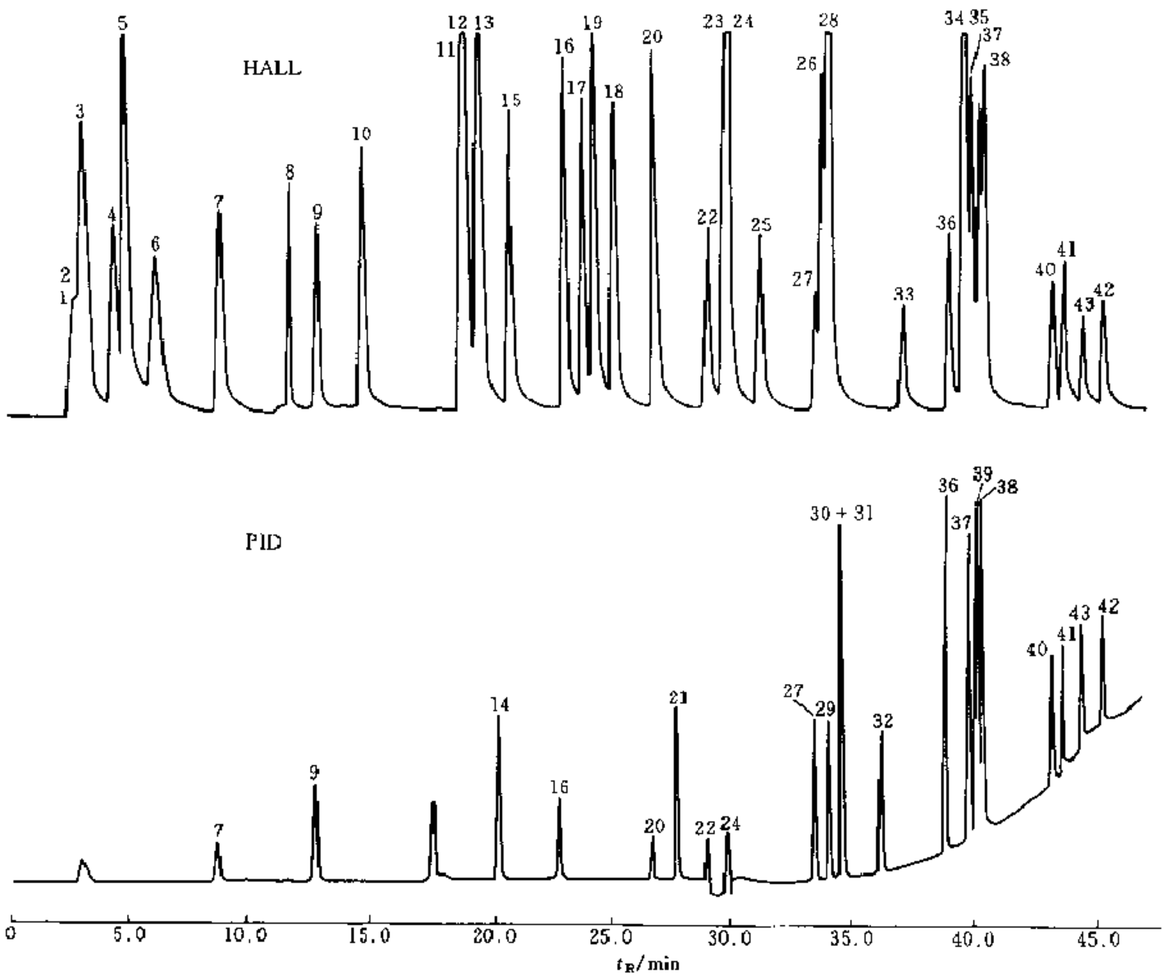
图 25-35 卤代烃（六）

色谱峰：1—1,1-二氯乙烯；2—二氯甲烷；3—1,2-二氯乙烯；4—1,1-二氯乙烷；5—甲乙酮；6—未知物；7—氯仿；8—1,2-二氯乙烷；9—1,1,1-三氯乙烷；10—苯；11—四氯甲烷；12—1,2-二氯丙烷；13—三氯溴甲烷；14—二氯溴甲烷；15—1,3-二氯丙烯；16—1,3-二氯丙烯；17—1,1,2-三氯乙烷；18—甲苯；19—氯代二溴甲烷；20—四氯乙烯；21—氯代苯；22—乙基苯；23—溴仿；24—D 10-邻二甲苯；25—四氯乙烷；26—间二氯苯；27—对二氯苯；28—邻二氯苯

色谱柱：CP Sil 8 CB，50m×0.32mm　　检测器：FID

柱　温：40℃（4min）→300℃，8.5℃·min^{-1}　　检测器温度：300℃

载　气：He，38kPa



色谱峰：1—二氯二氟甲烷；2—氯甲烷；3—氯乙烯；4—溴甲烷；5—氯乙烷；6—三氯氟甲烷；7—1,1-二氯乙烯；8—二氯甲烷；9—反-1,2-二氯乙烯；10—1,1-二氯乙烷；11—氯仿；12—1,1,1-三氯乙烷；13—四氯化碳；14—苯；15—1,2-二氯乙烷；16—三氯乙烯；17—1,2-二氯丙烷；18—溴代二氯甲烷；19—二溴甲烷；20—顺-1,3-二氯丙烯；21—甲苯；22—反-1,3-二氯丙烯；23—1,1,2-三氯乙烷；24—四氯乙烯；25—二溴代氯甲烷；26—1-氯己烷；27—氯苯；28—1,1,1,2-四氯乙烷；29—乙基苯；30—间二甲苯；31—对二甲苯；32—邻二甲苯；33—溴仿；34—1,1,2,2-四氯乙烷；35—1,2,3-三氯丙烷；36—溴苯；37—邻氯甲苯；38—对氯甲苯；39—间氯甲苯；40—1,3-二氯苯；41—1,4-二氯苯；42—苄基氯；43—1,2-二氯苯

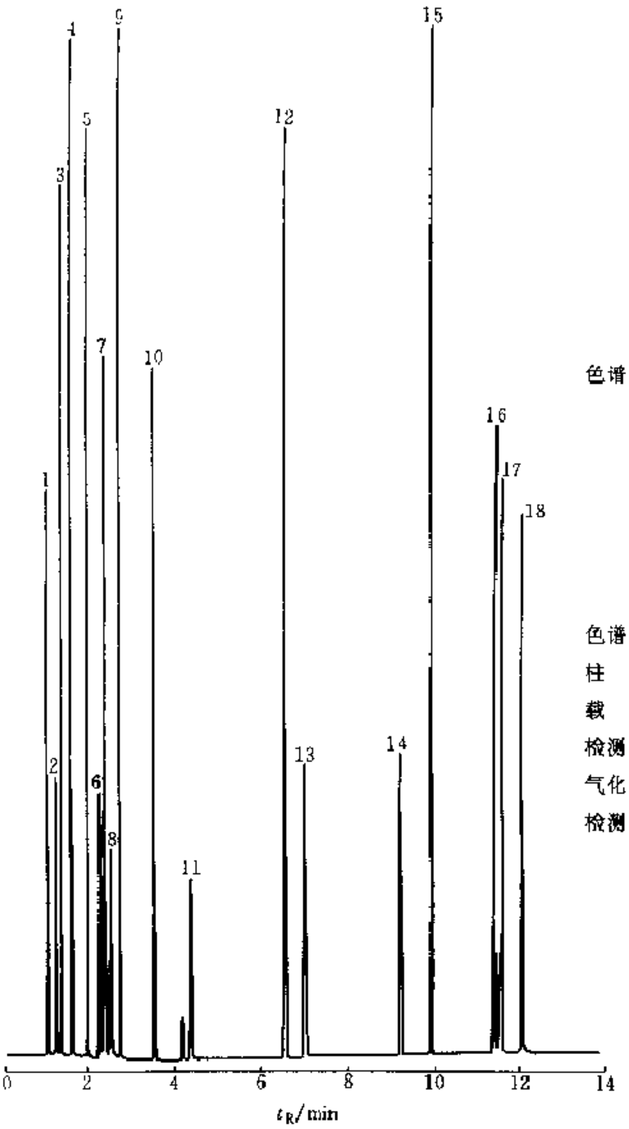
色谱柱：DB 624；30m×0.53mm

柱　温：5℃（7min）→115℃（10min），3℃·min^{-1}

载　气：He，10ml·min^{-1}

检测器：PID 与 Hall

图 25-36　卤代烃（七）[30]



色谱峰：1—1,1-二氯乙烯；2—二氯甲烷；3—反-1,2-二氯乙烯；4—1,1-二氯乙烷；5—顺-1,2-二氯乙烯；6—三氯甲烷；7—1,1,1-三氯乙烷；8—四氯化碳；9—1,2-二氯乙烷；10—1,1,2-三氯乙烯；11—溴二氯甲烷；12—1,1,2,2-四氯乙烯；13—氯代二溴甲烷；14—溴仿；15—1,1,2,2-四氯乙烷；16—间二氯苯；17—对二氯苯；18—邻二氯苯

色谱柱：DB-1301，30m×0.32mm，$d_f=1.0\mu m$

柱　温：35°C（4min）→120°C，10°C·min^{-1}

载　气：H_2，$\bar{u}=46cm\cdot s^{-1}$（50°C）

检测器：ECD

气化室温度：250°C

检测器温度：250°C

图 25-37　卤代烃（八）[33]

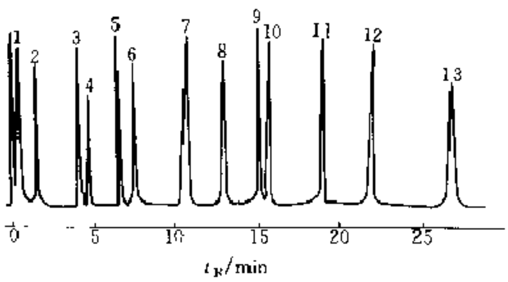


图 25-38　氯代苯（一）[4]

色谱峰：1—苯；2—氯苯；3—1,3-二氯苯；4—1,4-二氯苯；5—1,2-二氯苯；6—1,3,5-三氯苯；7—1,2,4-三氯苯；8—1,2,3-三氯苯；9—1,2,3,5-四氯苯；10—1,2,4,5-四氯苯；11—1,2,3,4-四氯苯；12—五氯苯；13—六氯苯

色谱柱：二乙二醇琥珀酸酯；10m×0.25mm　　载　气：N_2

柱　温：50°C→150°C，4°C·min^{-1}　　检测器：FID

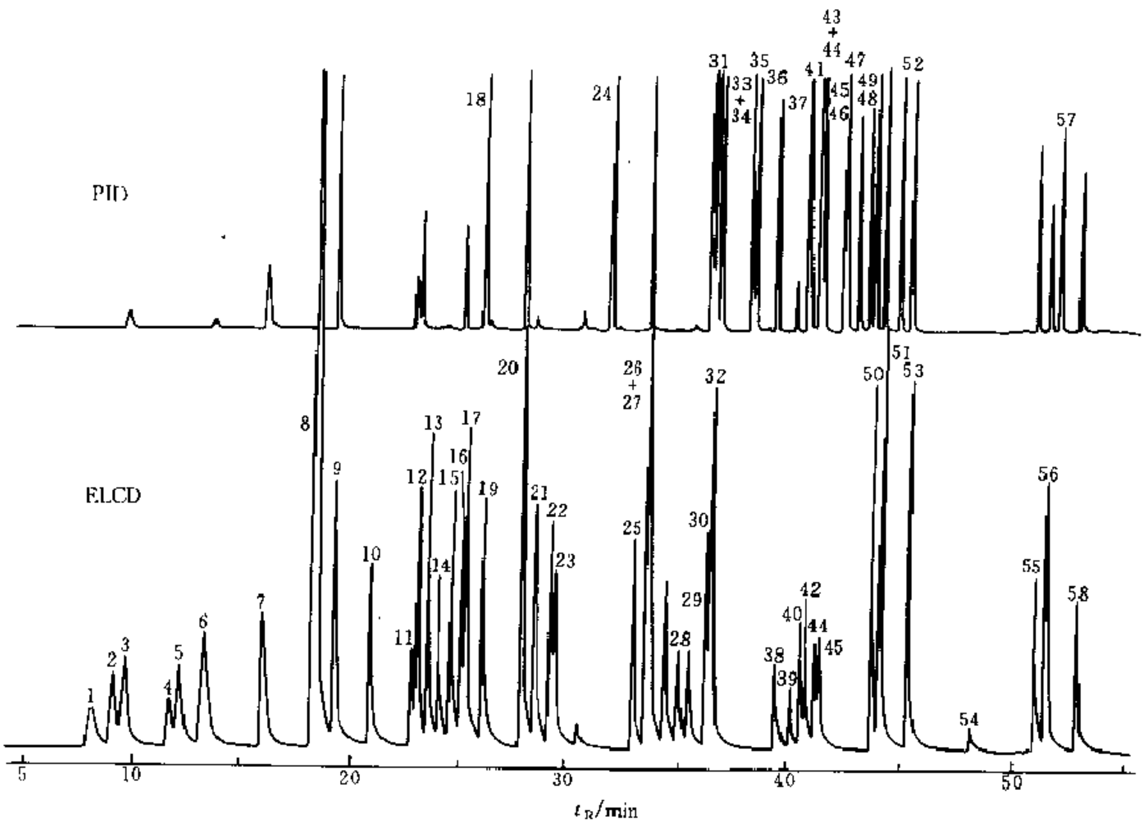


图 25-39　有机卤化合物与芳烃[32]

色谱峰：1—二氯二氟甲烷；2—氯代甲烷；3—氯乙烯；4—溴代甲烷；5—氯代乙烷；6—三氯一氟甲烷；7—1,1-二氯乙烯；8—二氯甲烷；9—反 1,2-二氯乙烯；10—1,1-二氯乙烷；11—2,2-二氯丙烷；12—顺 1,2-二氯乙烯；13—氯仿；14—一溴一氯甲烷；15—1,1,1-三氯乙烷；16—1,1-二氯丙烯；17—四氯化碳；18—苯；19—1,2-二氯乙烷；20—三氯乙烯；21—1,2-二氯丙烷；22—一溴二氯甲烷；23—二溴甲烷；24—甲苯；25—1,1,2-三氯乙烷；26—四氯乙烯；27—1,3-二氯丙烷；28—二溴一氯甲烷；29—1,2-二溴乙烷；30—氯代苯；31—乙基苯；32—1,1,1,2-四氯乙烷；33—间二甲苯；34—对二甲苯；35—邻二甲苯；36—苯乙烯；37—异丙基苯；38—溴仿；39—1,1,2,2-四氯乙烷；40—1,2,3-三氯丙烷；41—正丙基苯；42—溴代苯；43—1,3,5-三甲基苯；44—2-氯甲苯；45—4-氯甲苯；46—叔丁基苯；47—1,2,4-三甲基苯；48—仲丁基苯；49—对异丙基甲苯；50—1,3-二氯苯；51—1,4-二氯苯；52—正丁基苯；53—1,2-二氯苯；54—1,2-二溴-3-氯丙烷；55—1,2,4-三氯苯；56—六氯丁二烯；57—萘；58—1,2,3-三氯苯

色谱柱：VOCOL，60m×0.75mm

柱　温：10℃（8min）→180℃，4℃·min^{-1}

载　气：He

检测器：PID 与 ELCD

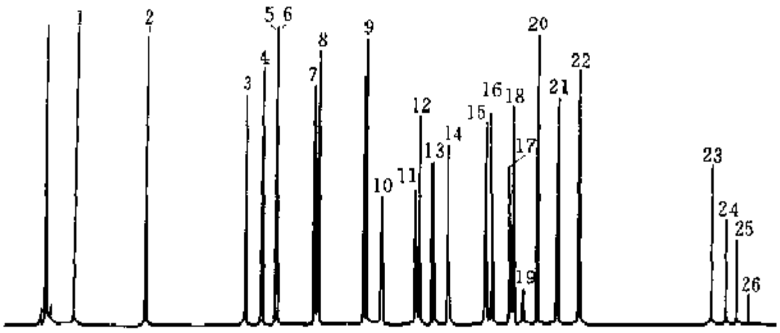


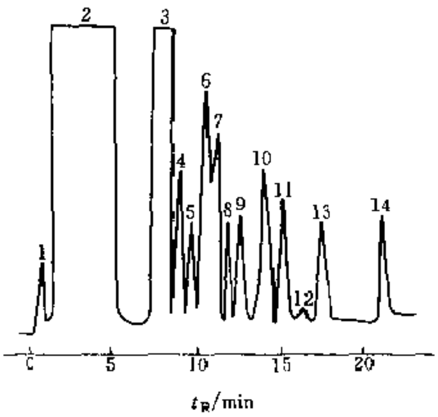
图 25-40 氯代苯（二）[35]

色谱峰：1—苯；2—甲苯；3—氯苯；4—乙基苯；5—间二甲苯；6—对二甲苯；7—邻二甲苯；8—苯乙烯；9—异丙基苯；10—溴代苯；11—邻氯甲苯；12—正丙基苯；13—对氯代甲苯；14—1,3,5-三甲基苯；15—叔丁基苯；16—1,2,4-三甲基苯；17—间二氯苯；18—仲丁基苯；19—对二氯苯；20—对异丙基甲苯；21—邻二氯苯；22—正丁基苯；23—1,2,4-三氯苯；24—萘；25—六氯丁二烯；26—1,2,3-三氯苯

色谱柱：DB-1301，30m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱　温：30℃（3min）→60℃，2℃·min⁻¹→120℃，5℃·min⁻¹

载　气：H_2，$\bar{u}$=37cm·s⁻¹（100℃）　　检测器：ECD



色谱峰：1—二氯甲烷；2—苯；3—甲苯；4—氯苯；5—间二甲苯；6—邻氯甲苯；7—对氯甲苯；8—间二氯代苯；9—邻二氯代苯；10—2,4-二氯甲苯；11—1,2,4-三氯苯；12—邻氯氯代甲苯；13—1,2,4,5-四氯苯；14—氯联苯

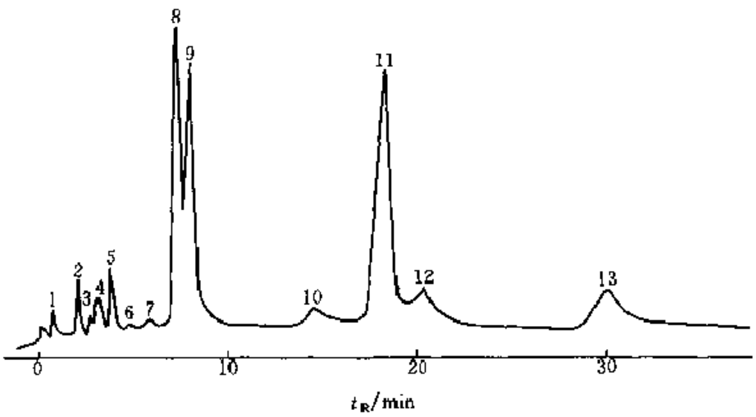
色谱柱：1.1%醚键合的 Zipax（100 目～140 目），1.7m×1.5mm

柱　温：100℃→275℃，10℃·min⁻¹

载　气：He，20ml·min⁻¹

检测器：FID

图 25-41 氯代苯（三）[36]



色谱峰：1—苯乙烯；2—β-氯代苯乙炔；3—反-β-氯代苯乙烯；4—顺-β-氯代苯乙烯；5—α-氯乙苯；6—β-氯乙苯；7—α,β-二氯代苯乙烯；8—β,β-二氯代苯乙烯；9—α,β-二氯乙苯；10—α,β,β-三氯代苯乙烯；11—α,β,β-三氯乙苯；12—α,α,β-三氯乙苯；13—四氯乙苯

色谱柱：3%癸二酸乙二醇聚酯，6201 担体（60 目～80 目），3m×4mm

柱　温：152℃

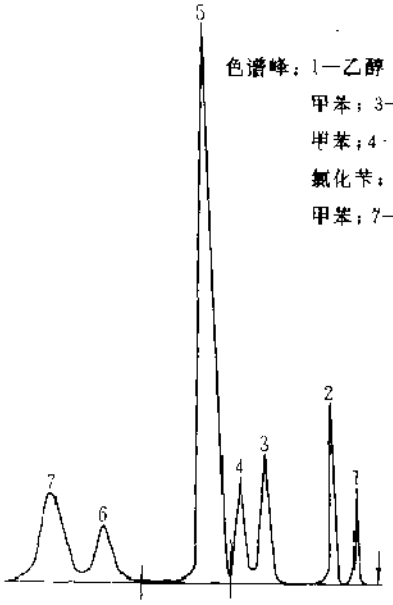
载　气：H_2，60ml·min⁻¹

检测器：TCD

气化室温度：240℃

检测器温度：170℃

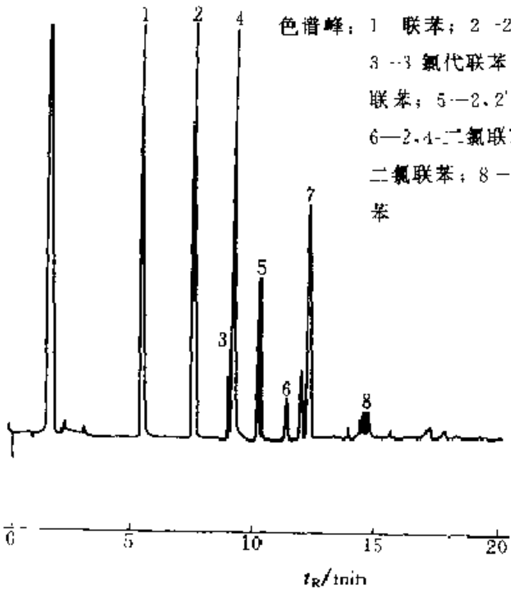
图 25-42 苯乙烯氯化物[37]



色谱峰：1—乙醇（溶剂）；2—甲苯；3—邻（间）氯甲苯；4—苯甲醛；5—氯化苄；6—2,4-二氯甲苯；7—亚苄基二氯

图 25-43 工业氯化苄[38]

色谱柱：Apiezon L＋硅油（V）－101 酸洗担体（80 目～100 目）质量比为 7：12：100，2m×4mm
柱 温：140°C 检测器：FID
载 气：N_2、30ml·min^{-1} 气化室温度：200°C
检测器温度：200°C



色谱峰：1—联苯；2—2-氯代联苯；3—3-氯代联苯；4—4-氯代联苯；5—2,2′-二氯联苯；6—2,4-二氯联苯；7—2,4′-二氯联苯；8—4,4′-二氯联苯

图 25-44 二氯联苯（一）[40]

色谱柱：DB-5，30m×0.25mm，d_f=1.0μm
柱 温：190°C（4min）→270°C（32min），4°C·min^{-1}
载 气：He（含 1.5%Ar） 气化室温度：300°C
检测器：FID 检测器温度：300°C

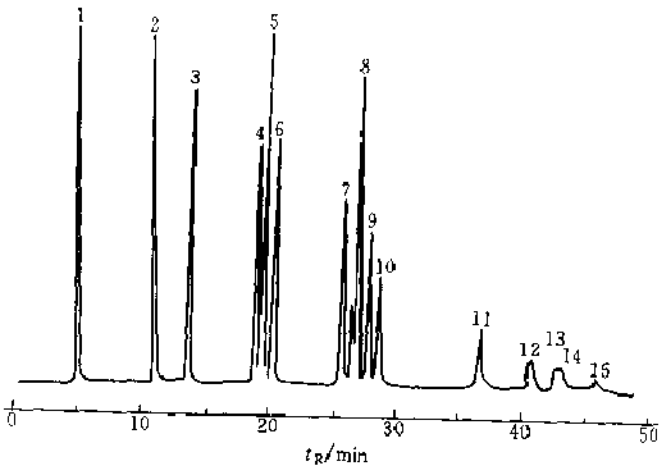


图 25-45 二氯联苯（二）[41]

色谱峰：1—苯；2—联苯；3—2-氯代联苯；4—2,2′-二氯联苯；5—3-氯代联苯＋联 2,6-二氯苯；6—4-氯代联苯；7—2,5-二氯联苯；8—2,3′-二氯联苯；9—2,3-二氯联苯；10—2,4′-二氯联苯；11—3,5-二氯联苯；12—3,3′-二氯联苯；13—3,4-二氯联苯；14—3,4′-二氯联苯；15—4,4′-二氯联苯
色谱柱：Apiezon L，61m 空心柱 检测器：氩离子化检测器
柱 温：185°C 气化室温度：270°C
载 气：Ar 检测器温度：240°C

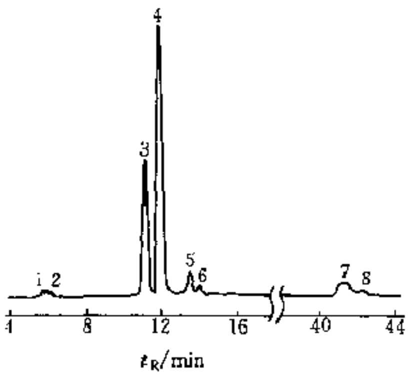


图 25-46 邻氯甲苯溴化反应物[19]

色谱峰：1—邻氯甲苯；2—对氯甲苯；3—邻氯对溴甲苯；4—邻氯间溴甲苯；5—邻氯溴化苄；6—对氯溴化苄；7，8—邻氯甲苯二溴化物异构体
色谱柱：己二酸新戊二醇聚酯，32m×0.3mm
柱 温：120°C 气化室温度：300°C
检测器：FID 检测器温度：200°C

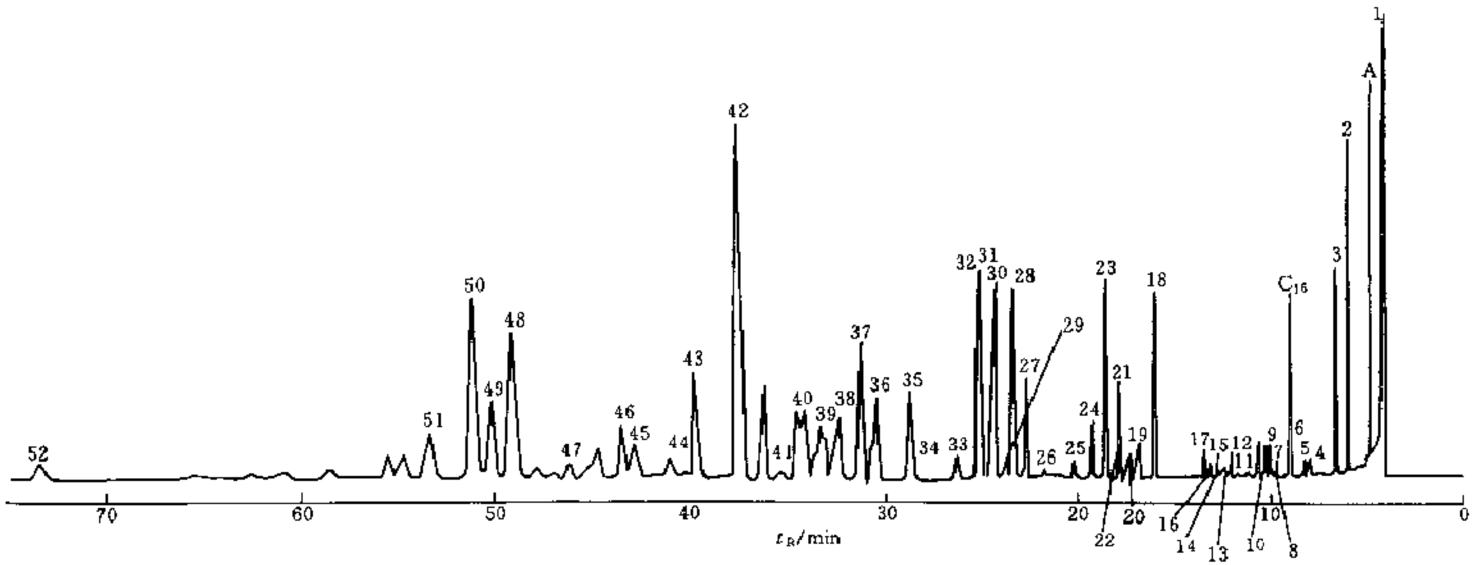


图 25-47　多氯联苯与烷基联苯[42]

色谱峰：1—正十二烷；2—正十四烷；3—联苯；4—2-氯联苯；5—3-甲基-（+4-氯）联苯；6—4-甲基-联苯；7—3-乙基-联苯；8—2,2′-二氯及/或 2,6-二氯联苯；9—3,3′-二甲基-联苯；10—4-氯联苯；11—3-异丙基-联苯；12—4-异丙基-联苯；13—2,5-二氯联苯；14—2,4-二氯联苯；15—2,3-二氯联苯；16—2,6,2′-三氯联苯；17—2,4′-二氯联苯；18—正十八烷—2,5,2′-三氯联苯；19—3,5-二异丙基-联苯—2,4,2′-三氯联苯；20—2,3,2′-三氯联苯；21—3,3′-二氯联苯；22—2,6,4′-二氯联苯；23—3,4′-二氯联苯+3,4-二氯联苯；24—4,4′-二氯联苯；25—3,3′-二异丙基-联苯；26—2,5,2′,6′-四氯联苯；27—3,5,2′-三氯联苯；28—2,5,4′-三氯联苯；29—2,4,3′-三氯（+2,3,2′,6′-四氯）-联苯；30—2,3,3′-三氯联苯+3,4′-二异丙基-联苯；31—2,4,4′-三氯联苯；32—2,3,4′-三氯联苯；33—3,4,2′-三氯联苯+2,3-二氯-3-异丙基联苯；34—4,4′-二异丙基-联苯；35—2,5,2′,5′-四氯联苯；36—2,4,2′,5′-四氯联苯；37—2,3,2′,5′-四氯联苯；38—2,4,2′,4′-四氯联苯；39—正二十烷；40—3,5,4′-三氯联苯+2,3,4,2′-四氯联苯；41—3,5-二氯-3′-异丙基联苯；42—3,4,3′-三氯联苯；43—3,4,4′-三氯联苯；44—3,4-二氯-3′-异丙基-联苯；45—3,5-二氯-4′-异丙基联苯；46—3,5,4′-三氯联苯；47—2,3,3′,5′-四氯联苯；48—2,5,3′,4′-四氯联苯；49—2,3,4,3′-四氯联苯；50—2,4,3′,4′-四氯联苯；51—2,3,3′,4′-四氯联苯；52—正二十二烷

色谱柱：Apiezon L，50m×0.25mm　　载　气：N_2

柱　温：200℃　　检测器：FID

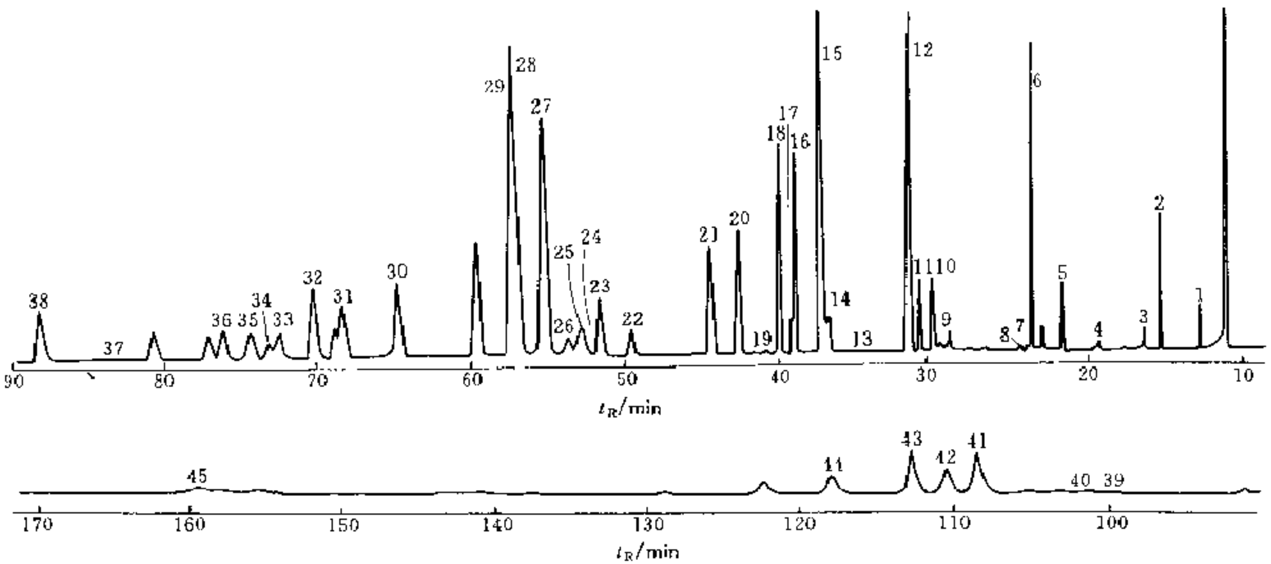


图 25-48　Aroclor 1242（一）[42]

色谱峰：1—正十二烷；2—正十四烷；3—联苯；4—2-氯联苯；5—正十六烷；6—2,6-氯联苯+2,2-氯联苯；7—3-氯联苯；8—4-氯联苯+2,5-氯联苯；9—2,4-氯联苯；10—2,3-氯联苯+2,6,2′-氯联苯；11—2,3′-氯联苯；12—2,4′-氯联苯；13—3,5-氯联苯；14—正十八烷；15—2,5,2′-氯联苯；16—2,4,2′-氯联苯；17—2,3,2′-氯联苯；18—2,6,2′,6′-氯联苯+2,6,3′-氯联苯；19—3,3′-氯联苯；20—2,6,4′-氯联苯+3,4-氯联苯+3,4′-氯联苯；21—4,4′-氯联苯；22—2,5,2′,6′-氯联苯+2,5,3′-氯联苯；23—3,5,2′-氯联苯；24—2,5,4′-氯联苯；25—2,4,2′,6′-氯联苯；26—2,4,3′-氯联苯+2,3,2′,6′-氯联苯+2,3,4-氯联苯；27—2,3,3′-氯联苯+2,4,4′-氯联苯；28—2,3,4′-氯联苯；29—3,4,2′-氯联苯；30—2,5,2′,5′-氯联苯；31—2,4,2′,5′-氯联苯；32—2,3,2′,5′-氯联苯；33—2,4,2′,4′-氯联苯+2,6,3′,5′-氯联苯+3,5,3′-氯联苯；34—正二十烷；35—2,3,2′,4′-氯联苯；36—2,3,2′,3′-氯联苯+3,5,4′-氯联苯+2,3,4,2′-氯联苯+2,6,3′,4′-氯联苯；37—3,4,3′-氯联苯；38—3,4,4′-氯联苯+2,5,3′,5′-氯联苯；39—2,4,3′,5′-氯联苯；40—2,3,3′,5′-氯联苯；41—2,5,3′,4′-氯联苯；42—2,3,4,3′-氯联苯；43—2,3,3′,4′-氯联苯+2,3,4,4′-氯联苯；44—2,3,3′,4′-氯联苯+3,5,3′,5′-氯联苯+3,4,3′,5′-氯联苯+3,4,3′,4′-氯联苯；45—正二十二烷

色谱柱：Apiezon L，50m×0.25mm

柱　温：200℃

载　气：N_2

检测器：FID

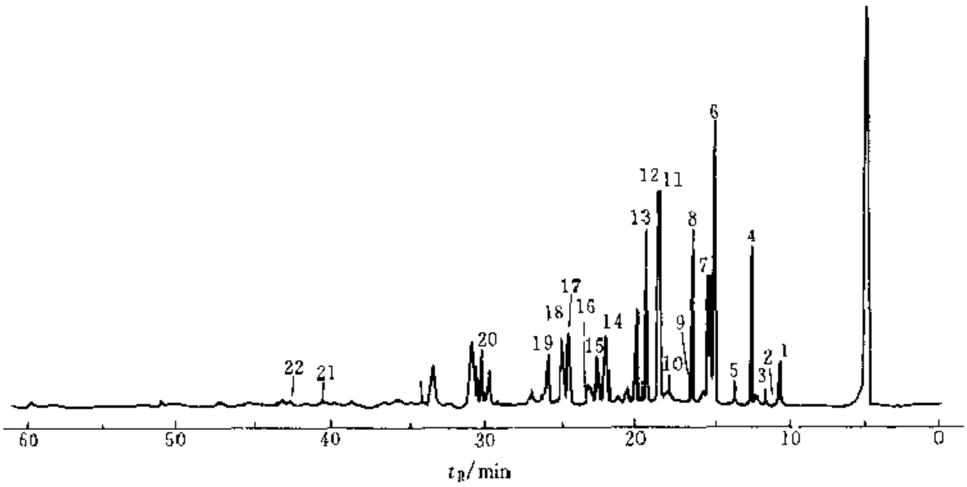


图 25-49　Aroclor 1242 (二)[43]

色谱峰：1—2,2′-氯联苯；2—2,4-氯联苯；3—2,3′-氯联苯；4—2,4′-氯联苯；5—2,2′,6-氯联苯；6—2,2′,5 氯联苯；7—4,4′-氯联苯+2,2′,4-氯联苯；8—2,2′,3-氯联苯；9—2,3′,5-氯联苯；10—2,3′,4 氯联苯；11—2,4′,5-氯联苯；12—2,4,4′—氯联苯；13—2′,3,4-氯联苯；14—2,2′,5,5′-氯联苯；15—2,2′,4,5′-氯联苯；16—2,2′,4,4′-氯联苯；17—2,2′,3,5′-氯联苯；18—2,2′,3,4′-氯联苯；19—2,2′,3,3′-氯联苯；20—2,3′,4′,5-氯联苯；21—2,2′,3,4,5′-氯联苯；22—3,3′,4,4′-氯联苯

色谱柱：OV-101，50m×0.25mm　　载　气：N_2

柱　温：200℃　　气化室温度：250℃

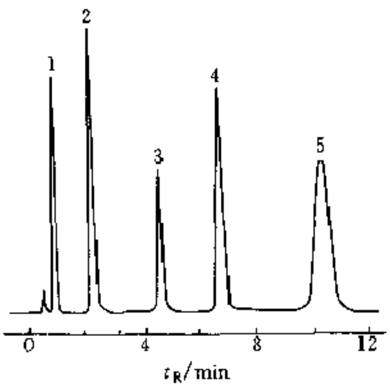


图 25-50　溴代苯[44]

色谱峰：1—苯；2—一溴代苯；3—对二溴代苯；4—间二溴代苯；5—邻二溴代苯

色谱柱：3%有机皂土 34+10% DC 200，Chromosorb W(80 目～100 目)，3.05m×2.4mm

柱　温：160℃　　气化室温度：170℃

载　气：He，32ml・min⁻¹　　检测器温度：170℃

检测器：TCD

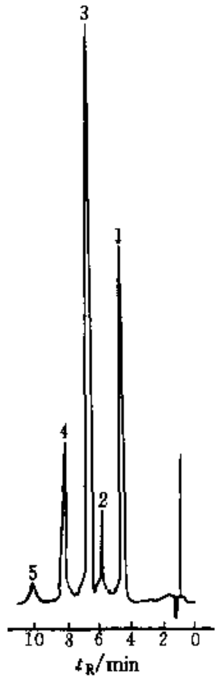


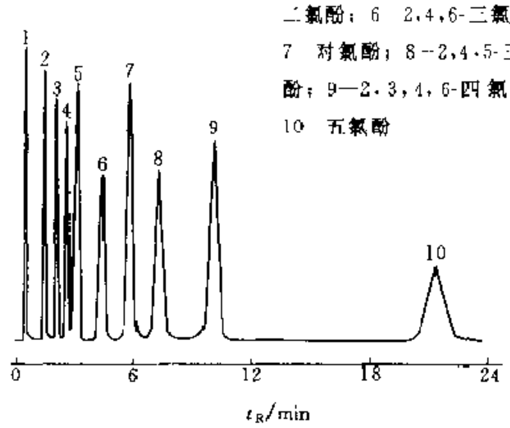
图 25-51　卤代醇[45]

色谱峰：1—1-氯-2-丙醇；2—1-氯-1-丙醇；3—内标物；4—1-溴-2 丙醇；5—1-溴-1-丙醇

色谱柱：7%Tween-80，Chromosorb W，2m×3mm

柱　温：115℃　　检测器：FID

载　气：N_2，40ml・min^{-1}　　检测器温度：200℃



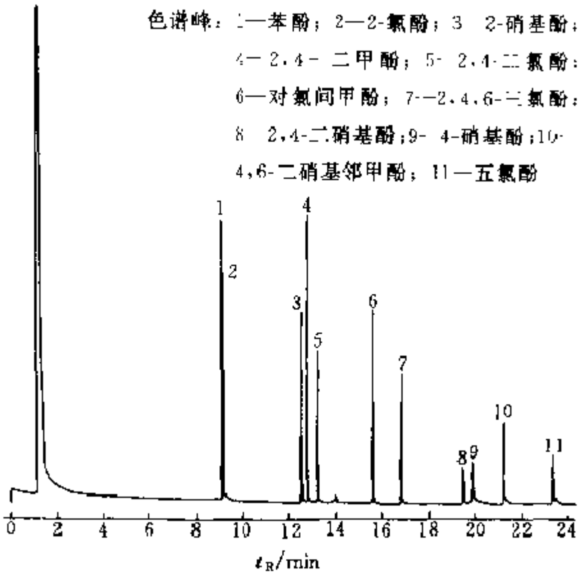
色谱峰：1—苯；2—邻氯苯酚；3—苯酚；4—2,6-二氯酚；5—2,3-二氯酚+2,4-二氯酚+2,5-二氯酚；6—2,4,6-三氯酚；7—对氯酚；8—2,4,5-三氯酚；9—2,3,4,6-四氯酚；10—五氯酚

图 25-52 氯代酚（一）[46]

色谱柱：20% Carbowax 20M + 1.7% H_3PO_4，Gas Chrom P（60 目～80 目），3m×6mm

柱 温：200℃

载 气：He，120ml·min^{-1} 检测器：TCD



色谱峰：1—苯酚；2—2-氯酚；3—2-硝基酚；4—2,4-二甲酚；5—2,4-二氯酚；6—对氯间甲酚；7—2,4,6-三氯酚；8—2,4-二硝基酚；9—4-硝基酚；10—4,6-二硝基邻甲酚；11—五氯酚

图 25-53 氯代酚（二）[47]

色谱柱：SE-54，30m 空心柱

载 气：H_2，$\bar{u}$=42cm·s^{-1}

柱 温：50℃→260℃，8℃·min^{-1} 检测器：FID

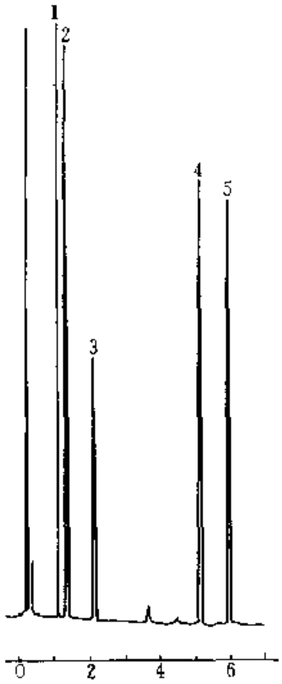


图 25-54 卤化醚[48]

色谱峰：1—双（2-氯乙基）醚；2—双（2-氯异丙基）醚；3—双（2-氯乙氧基）甲烷；4—1-氯苯基苯基醚；5—4-溴苯基苯基醚

色谱柱：BP 10，12m×0.53mm，d_f=1.0μm

柱 温：100℃→195℃（1min），15℃·min^{-1}

检测器：FID

色谱峰：1—溶剂；2—氯苯；3—对二氯苯；4—硝基苯；5—间硝基氯苯；6—对硝基氯苯；7—邻硝基氯苯

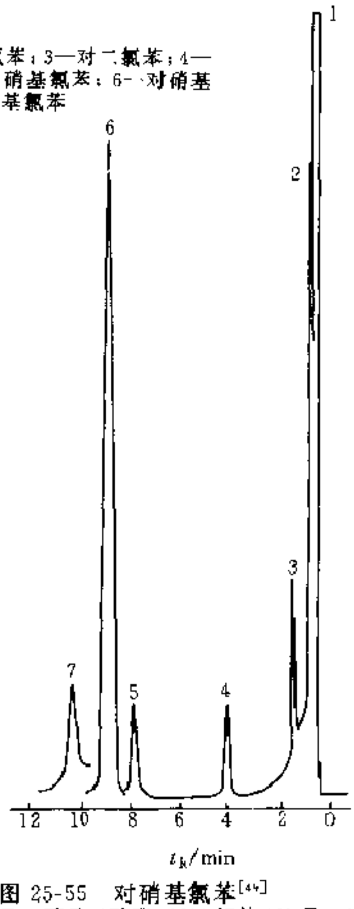


图 25-55 对硝基氯苯[49]

色谱柱：3% 聚乙二醇己二酸酯，6201 担体（60 目～80 目），2m×3mm

柱 温：135℃ 气化室温度：260℃

载 气：N_2，25ml·min^{-1} 检测器温度：210℃

检测器：FID

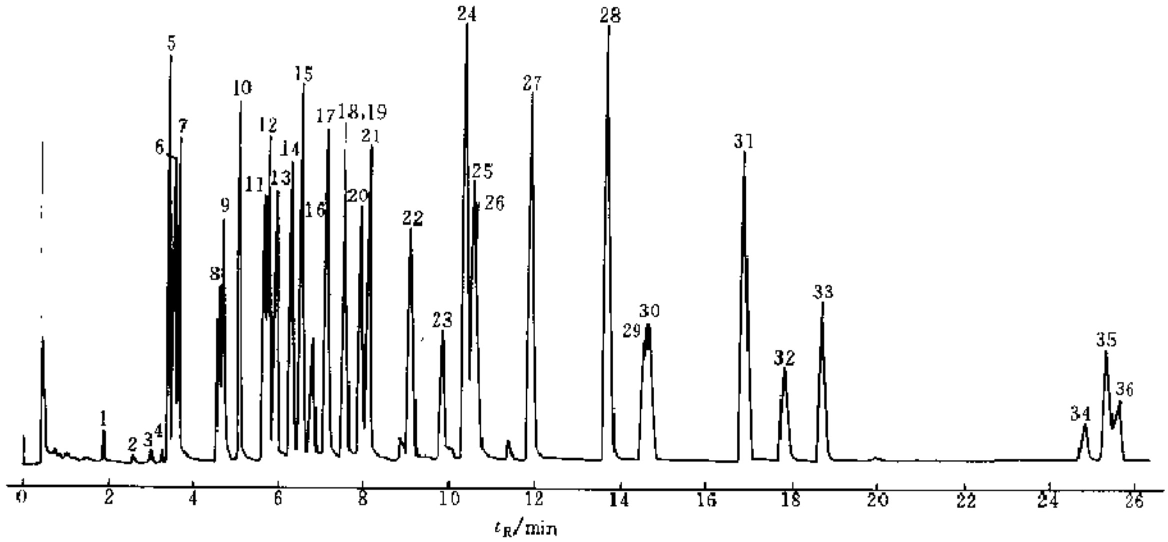


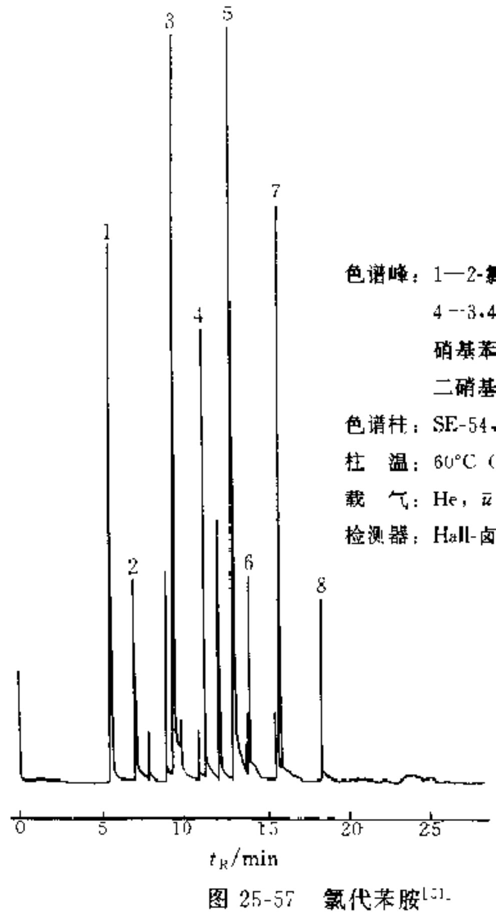
图 25-56　氯代硝基芳烃[60]

色谱峰：1—硝基苯；2—邻硝基甲苯；3—间硝基甲苯；4—对硝基甲苯；5　1-氯-3-硝基苯；6—1-氯-4-硝基苯；7—1-氯-2-硝基苯；8—2-氯-6-硝基甲苯；9—4-氯-2-硝基甲苯；10—3,5-二氯硝基苯；11—2,5-二氯硝基苯；12—2，4-二氯硝基苯；13—4-氯-3-硝基甲苯；14—3,4 二氯硝基苯；15—2,3-二氯硝基苯；16—2,4,6-三氯硝基苯；17—1,4-萘醌；18—1,2,4 三氯-5-硝基苯；19—1,4-二硝基苯；20—2,6 二硝基甲苯；21　1,2,3-二硝基苯；22—1,2,3-三氯-4-硝基苯；23—2,3,5,6-四氯硝基苯；24—1,2-二硝基苯；25—2,4-二硝基甲苯；26—1-氯-2,4-二硝基苯；27—2,3,4,5-四氯硝基苯；28—1-氯-3,4-二硝基苯；29—氟乐灵；30—氟草胺；31—五氯硝基苯；32—卡乐施；33—敌乐胺；34—地乐胺；35—异乐灵；36　胺硝草

色谱柱：SPB-5，30m×0.53mm，d_f—1.5μm　　检测器：ECD

柱　温：120℃（1min）→210℃，3℃·min^{-1}　　检测器温度：250℃

载　气：He，10.5ml·min^{-1}



色谱峰：1—2-氯代苯胺；2—4 氯代苯胺；3—2,5-二氯苯胺；4—3,4 二氯苯胺；5—2,4,5-三氯苯胺；6—4-氯-2-硝基苯胺；7—2,6-二氯-4-硝基苯胺；8—2-氯-4,6-二硝基苯胺

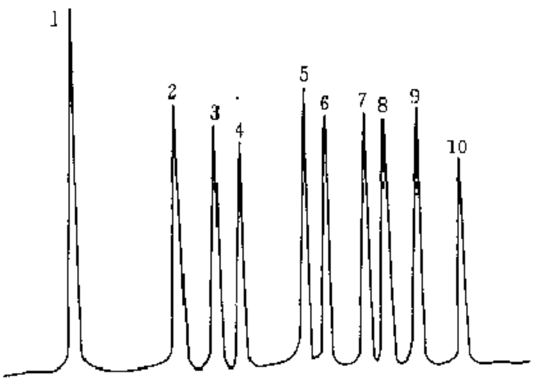
色谱柱：SE-54，15m×0.25mm

柱　温：60℃（2min）→275℃，8℃·min^{-1}

载　气：He，$\bar{u}$＝24cm·s^{-1}

检测器：Hall-卤素型

图 25-57　氯代苯胺[51]



色谱峰：1—2,6-二氯苯胺；2—2,4-二氯苯胺+2,5-二氯苯胺；3—2,3-二氯苯胺；4—2,6-二氯亚硫酰基苯胺；5—3,5-二氯亚硫酰基苯胺；6—3,5-二氯苯胺；7—2,5-二氯亚硫酰基苯胺；8—2,4-二氯亚硫酰基苯胺；9—3,4-二氯亚硫酰基苯胺；10—2,3-二氯亚硫酰基苯胺

色谱柱：聚苯醚 OS-138 及 Silar 10C，Chromosorb G AW-DMCS（60 目～100 目），50m×1mm

柱　温：180℃

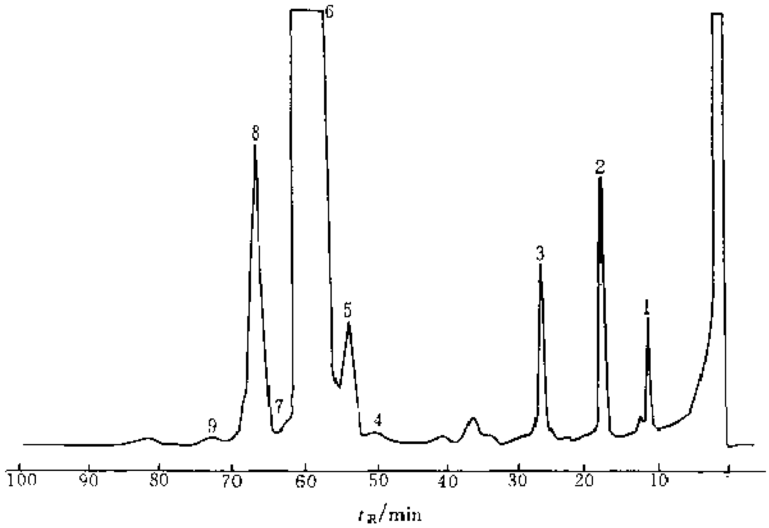
载　气：H_2，7ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：200℃

检测器温度：220℃

图 25-58　二氯苯胺[52]



色谱峰：1—二氯二苯硫醚；2—三氯二苯硫醚；3—四氯二苯硫醚；4—3,3'-二氯二苯砜；5—3,4'-二氯二苯砜；6—4,4'-二氯二苯砜；7—2,3'-二氯二苯砜；8—2,4'-二氯二苯砜；9—2,2'-二氯二苯砜

色谱柱：10% OV-225，Chromosorb P（80 目～100 目），3m×3mm

柱　温：255℃　载　气：N_2，8ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：320℃

检测器温度：310℃

图 25-59　二氯二苯砜异构物[31]

参 考 文 献

1　Campbell R H，Gudzinowicz B J．Anal Chem，1961；33：842

2　程微微，马桂兰，朱沁龙．分析化学，1987；15：588

3　GB 12022—89．中国国家标准汇编，1993；148：160

4　Ellis J F，Iveson G．In Desty D H，ed．Gas Chromatography 1958．London：Butterworths，1958：300

5　Juvet R S，Fischer R L．Anal Chem，1966；38：1860

6　Sie S T，Bleumer J P A，Rijnders G W A．Separation Science，1966；1：41

7　Pommier C，Eon C，Fould H，et al．Bull Soc Chim(Fr)，1969：1401

8　Alltech．Cromatography Catalog 350，1995：155

9　Greene S A，Wachi F W．Anal Chem，1963；35：928

10　中国科学院大连化学物理研究所．气相色谱法，北京：科学出版社，1972：221

11　胡金宝，施新娣．色谱，1987；5：177

12　GB 7375—87．中国国家标准汇编，1990；85：87

13　GB 9016—88．中国国家标准汇编，1992；105：749

14　GB 9017—88．中国国家标准汇编，1993；105：757

15　岛津．Gas Chromatograph Data Sheet，CA180-923

16　Applied Science Europe B V Catalog 22：34

17 J Chrom Sci，1992；30：197
18 Chrompack News，1987；14(3)：7
19 GB 4117—92
20 GB 4118—92
21 ZB G16 007—89
22 ZB G16 008—89
23 天津化工厂．聚氯乙烯生产工业分析，北京：燃料化学工业出版社，1973；125
24 Kusz P，Andrysiak A，Pokorska Z．J Chromatogr，1984；286：287
25 Hinshaw L D．J Gas Chrom，1966；4：300
26 Mangani F，Bruner F．J Chromatogr，1984；289：85
27 Reunanen M，Kroreld R．J Chrom Sci，1982；20：449
28 J&W Scientific．1994-1995 Chromatography Catalog & Reference Guide，1995：193
29 Pankow J F，Isabelle L M．HRC&CC，1987；10：617
30 Lepez Avila V，Heath N，Hu A．J Chrom Sci，1987；25：356
31 朱静．第六次全国色谱学术报告会文集，1987：248
32 Shou-Yien Ho J．J Chrom Sci，1989；27：91
33 Mehran M F，Cooper W J，Lautamo R，et al．HRC&CC，1985；8：715
34 Hrivnak J，Michalek M．Chromatographia，1970；3：123
35 Freeman P R，Jennings W．HRC&CC，1987；10：231
36 Kirkland J J，Destefano J J．J Chrom Sci，1970；8：309
37 兰州大学化学系．兰州大学学报．自然科学版，1977；(1)：88
38 HG 2027—91
39 沈能熙，侯天成．色谱，1991；9：63
40 Schneider J F，Reedy G T，Ettinger D G．J Chrom Sci，1985；23：49
41 Weingarten H，Ross W D，Schlater J M，et al．Anal Chim Acta，1962；26：391
42 Krupcik J，Leclercq P A，Garaj J，et al．J Chromatogr，1980；191：207
43 Krupcik J，Leclercq P A，Simova A，et al．J Chromatogr，1976；119：271
44 Karasek F W．J Chrom Sci，1970；8：282
45 易淑云．色谱，1990：8：328
46 Kolloff R H，Breuklander L J，Barkley L B．Anal Chem，1963：35：1651
47 Supelco．Catalog 18：27
48 SGE．Analytical Products 1993/1994 Catalogue，1994：54
49 GB 6817—92
50 Supelco．Chromatography Products 1994，1994：743
51 Lopez-Avila V，Northcutt R．HRC&CC，1982；5：67
52 Czerwiec Z．J Chromatogr，1977；139：177

（李浩春　李全洪）

第二十六章　特殊化合物色谱图

第一节　氢化物与元素有机化合物色谱图

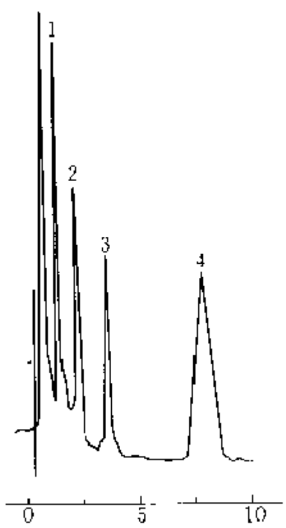


图 26-1　氢化物(一)[1]

色谱峰：1—GeH_4；2—AsH_3；3—SnH_4；4—SbH_3

色谱柱：GDX-104（80 目～100 目），1.6m×2.5mm

柱　温：48℃

载　气：N_2，35 ml·min^{-1}

检测器：FPD 改制的元素光度检测器（干涉滤光片波长 420nm）

检测器温度：120℃

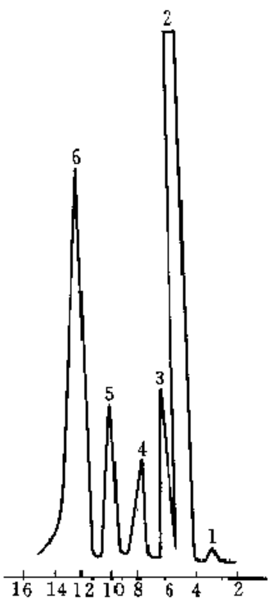


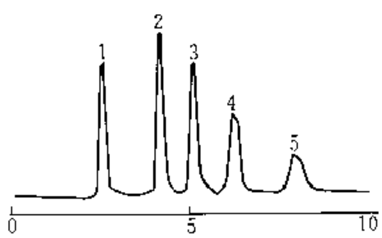
图 26-2　氢化物(二)[2]

色谱峰：1—H_2；2—SiH_4；3—GeH_4；4—PH_3；5—AsH_3；6—H_2S

色谱柱：25%苯基甲基硅氧烷，8m

柱　温：30℃

载　气：N_2，17ml·min^{-1}



色谱峰：1—空气；2—氢化锗；3—氢化砷；4—氢化锡；5—氢化锑

色谱柱：Porapak Q，0.91m

柱　温：75℃→120℃，8℃·min^{-1}

载　气：N_2

检测器：TCD

图 26-3　氢化物(三)[88]

色谱峰：1—B_2H_6；2—B_4H_{10}；3—B_5H_9；4—B_5H_{11}
色谱柱：33%石蜡油，Celite 545（60 目～100 目），3.05m×6mm
柱　温：27℃
载　气：He，111ml·min^{-1}
检测器：TCD

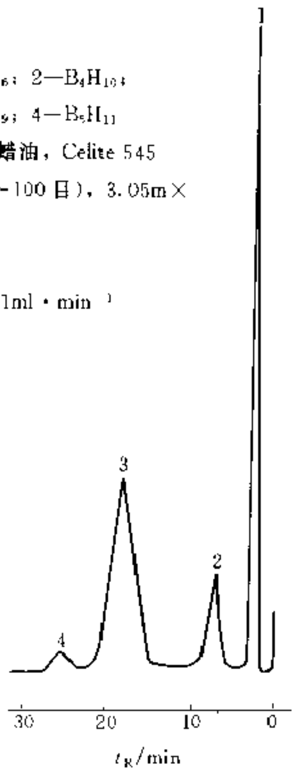


图 26-4　硼氢化合物[4]

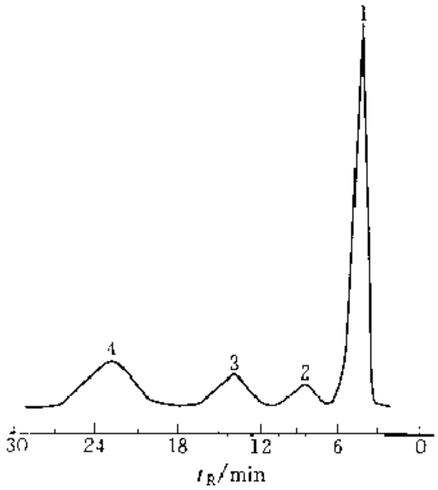


图 26-5　甲基硼化合物[5]

色谱峰：1—B_2H_6；2—$CH_3B_2H_5$；3—$(CH_3)_3B$；4—1,1-$(CH_3)_2B_2H_4$
色谱柱：38%矿物油，耐火砖（32 目～65 目），1.25m×4mm
柱　温：0℃
载　气：He，2.73 ml·min^{-1}
检测器：TCD

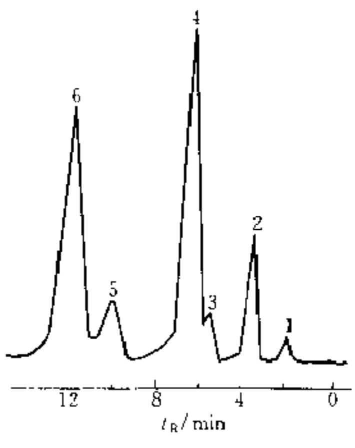


图 26-6　烷基硼化合物[6]

色谱峰：1—$B(C_2H_5)_3$；2—$B(C_2H_5)_2(n\text{-}C_3H_7)$；3—$B(C_2H_5)(n\text{-}C_3H_7)(i\text{-}C_3H_7)$；4—$B(C_2H_5)(n\text{-}C_3H_7)_2$；5—$B(n\text{-}C_3H_7)_2(i\text{-}C_3H_7)_2$；6—$B(n\text{-}C_3H_7)$
色谱柱：硅油，Celite 545，1m
柱　温：80℃
载　气：He，100 ml·min^{-1}

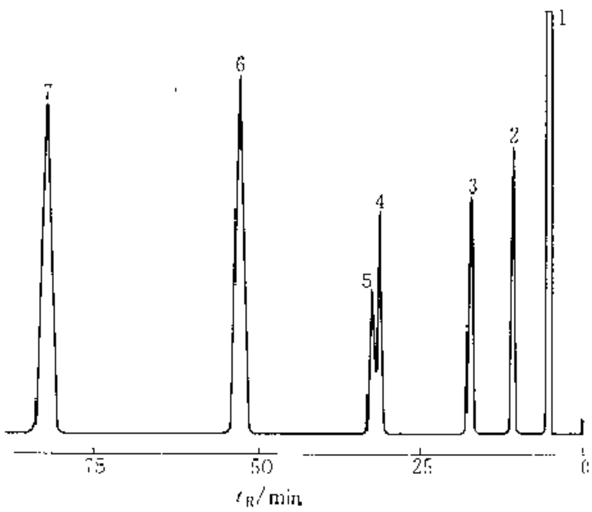


图 26-7　碳硼烷[7]

色谱峰：1—溶剂；2—1,12-$C_2B_{10}H_{12}$；3—1,7-$C_2B_{10}H_{12}$；4—5,6-$C_2B_8H_{12}$；5—1,2-$C_2B_8H_{10}$；6—2,3-$C_2B_9H_{11}$；7—1,2-$C_2B_{10}H_{12}$
色谱柱：8.4%XE-60，Chromosorb W DMCS（60 目～80 目）
柱　温：180℃
载　气：N_2，60ml·min^{-1}
检测器：FID

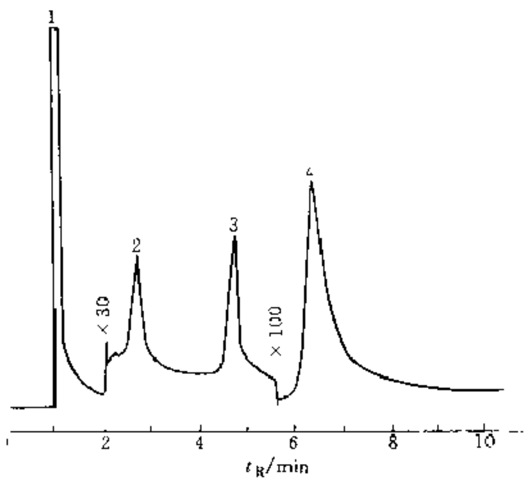


图 26-8 卤代硼烷[8]

色谱峰：1—乙硼烷＋氯化氢；2—氯乙硼烷；3—二氯硼烷；4—三氯化硼

色谱柱：30％正十六烷，Chromosorb（60 目～80 目），5.49m×6mm

柱　温：40℃

载　气：He，400ml・min^{-1}

检测器：TCD

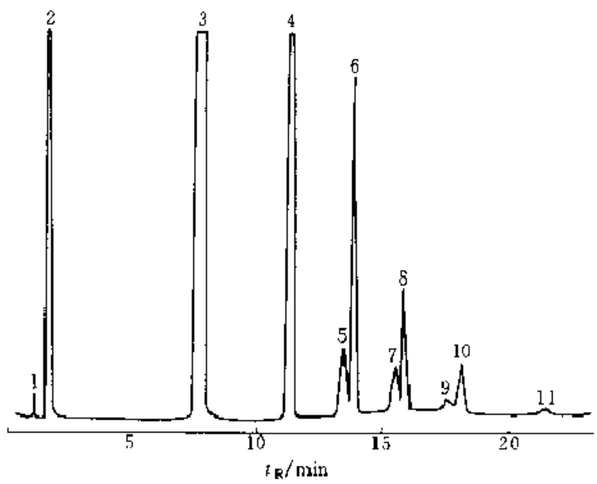


图 26-9 硅烷[9]

色谱峰：1—H_2；2—SiH_4；3—Si_2H_6；4—Si_3H_8；5—i-Si_4H_{10}；6—n-Si_4H_{10}；7—i-Si_5H_{12}；8—n-Si_5H_{12}；9—i-Si_6H_{14}；10—n-Si_6H_{14}；11—Si_7H_{16}

色谱柱：Porapak P（80 目～100 目），1.83m×3mm

柱　温：36℃（4min）→210℃（20min），15℃・min^{-1}

载　气：He，30 ml・min^{-1}

检测器：TCD

气化室温度：100℃

检测器温度：230℃

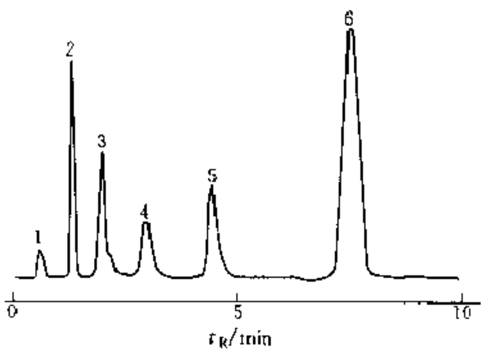


图 26-10 卤代硅烷[10]

色谱峰：1—空气；2—$SiCl_4$；3—$SiCl_3Br$；4—$SiCl_2Br_2$；5—$SiClBr_3$；6—$SiBr_4$

色谱柱：5％甲基硅油，Fluoropak 80，3.00m×3mm

柱　温：90℃

载　气：H_2，25 ml・min^{-1}

检测器：TCD

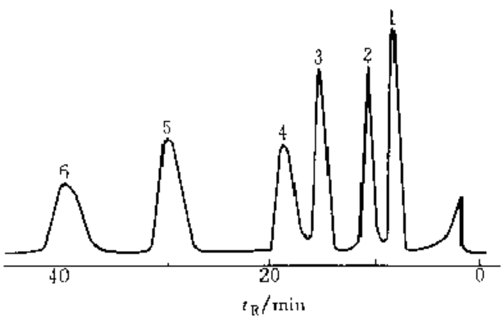


图 26-11 甲基氯化硅(一)[11]

色谱峰：1—HSiCl；2—$SiCl_4$；3—CH_3SiHCl_2；4—$(CH_3)_3SiCl$；5—CH_3SiCl_3；6—$(CH_3)_3SiCl$

色谱柱：30％硝基苯，Infusorial earth，1.30m×4mm

柱　温：25℃

载　气：N_2，38.5 ml・min^{-1}

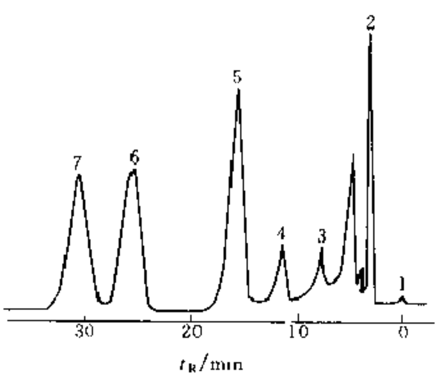


图 26-12 甲基氯化硅(二)[12]

色谱峰：1—HCl；2—$(CH_3)_4Si$；3—$HSiCl_3$；4—$SiCl_4$；5—$(CH_3)_3SiCl$；6—$(CH_3)SiCl_3$；7—$(CH_3)_2SiCl_2$

色谱柱：60%酞酸二乙酯+20%硅油，硅藻土，4.1m

柱　温：60℃

载　气：H_2，40 ml·min^{-1}

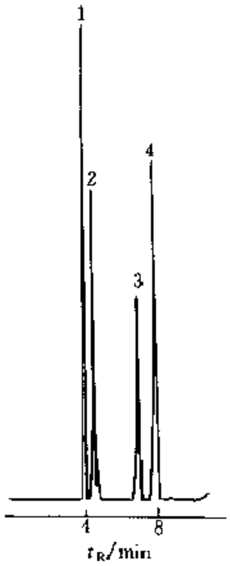


图 26-13 氯代硅烷[13]

色谱峰：1—二甲基氯硅烷；2—甲基二氯硅烷；3—甲基三氯硅烷；4—二甲基二氯硅烷

色谱柱：Rtx 200，60m×0.53mm，d_f=3.0 μm

柱　温：40℃(9min)→250℃(5min)，15℃·min^{-1}

载　气：H_2，$\bar{u}$=40cm·s^{-1}

检测器：FID

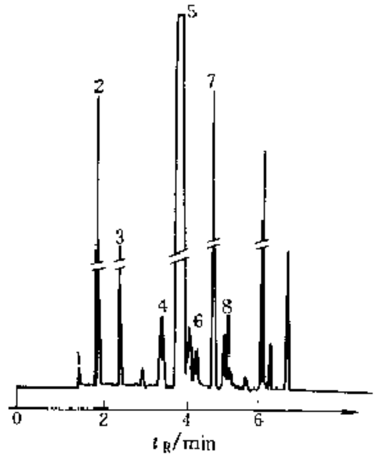


图 26-14 二苯基二甲氧基硅烷[14]

色谱峰：1—甲醇；2—苯基三甲氧基硅烷；3—联苯；4—氯代联苯；5—二苯基二甲氧基硅烷；6，7—二氯联苯；8—(三个峰)三氯联苯

色谱柱：SE-54，25m×0.25mm

柱　温：200℃（1min）→280℃（4min），15℃·min^{-1}

载　气：N_2，2 ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：290℃

检测器温度：290℃

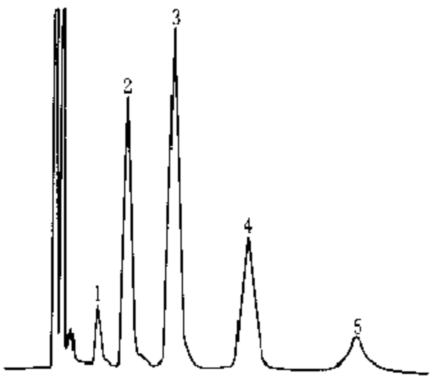


图 26-15 烷基铅(一)[15]

色谱峰：1—$(CH_3)_4Pb$；2—$(CH_3)_3Pb(C_2H_5)$；3—$(CH_3)_2Pb(C_2H_5)_2$；4—$(CH_3)Pb(C_2H_5)_3$；5—$(C_2H_5)_4Pb$

色谱柱：16%1,2,3-三(2-氰乙氧基)丙烷，Chromosorb W HMDS（80目～100目），3.05m×3mm

柱　温：72℃

载　气：N_2，27 ml·min^{-1}

检测器：ECD

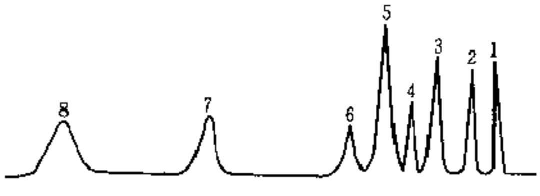


图 26-16 烷基铅(二)[16]

色谱峰：1—$(CH_3)_4Pb$；2—$(CH_3)_3Pb(C_2H_5)$；3—$(CH_3)_2Pb(C_2H_5)_2$；4—甲苯；5—二氯乙烷；6—$(CH_3)Pb(C_2H_5)_3$；7—$(C_2H_5)_4Pb$；8—二溴乙烷

色谱柱：10%PEG 400+1% N，N，N'，N'-四（2-羟丙基）乙二胺，Chromosorb W（80目～100目），2m×4mm

柱　温：63℃

载　气：H_2，76.3 ml·min^{-1}

检测器：TCD

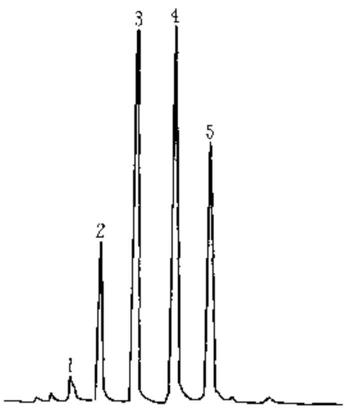


图 26-17 含铅汽油[17]

色谱峰：1—四甲基铅；2—三甲基乙基铅；3—二甲基二乙基铅；4—甲基三乙基铅；5—四乙基铅

色谱柱：3%SP-2100，Supelcoport (100 目～120 目)，2m×2mm

柱 温：60℃→180℃，15℃·min⁻¹

载 气：$Ar+5\%CH_4$，40ml·min^{-1}

检测器：RFID

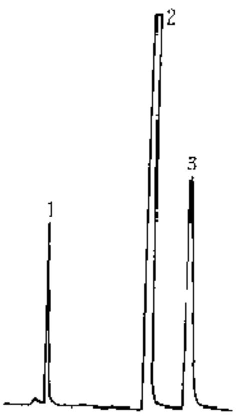


图 26-18 脱铅汽油[17]

色谱峰：1—三乙基硅(277ng)；2—四乙基铅 (20ng)；3 四乙基锡 (85ng)

色谱柱：3% SP-2100，Supelcoport (100 目～120 目)，2m×2mm

柱 温：80℃→200℃，16℃·min^{-1}

载 气：$Ar+5\%\ CH_4$，23ml·min^{-1}

检测器：RFID (极化电压−15V)

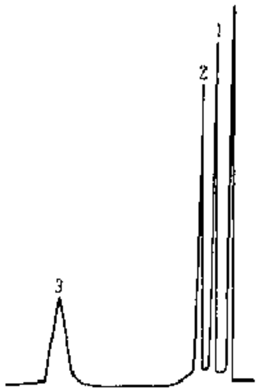


图 26-19 二烷基汞 (氯化铜衍生物)[19]

色谱峰：1 二甲基汞；2—二乙基汞；3 二苯基汞

色谱柱：2% OV-17 + 2.0% QF-1，Gas Chrom Q (60 目～80 目)，2m×2mm

柱 温：160℃

载 气：N_2，60 ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：210℃

检测器温度：240℃

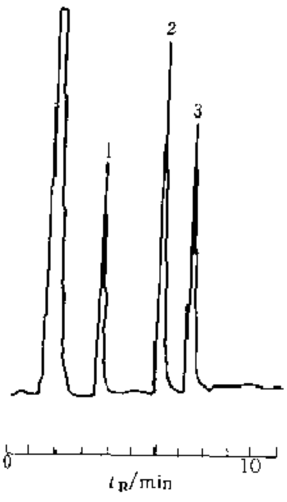


图 26-20 痕量有机汞化合物[20]

色谱峰：1 二甲基汞 (2.00pgHg)；2—甲基汞 (3.79pgHg)；3—乙基汞 (2.50pgHg)

色谱柱：DB 1，15m×0.53mm，d_f=1μm

柱 温：10℃ (1min) →140℃ (3min)，60℃·min^{-1}→200℃ (10min)，50℃/min

载 气：He，4.0 ml·min^{-1}

检测器：原子荧光检测器

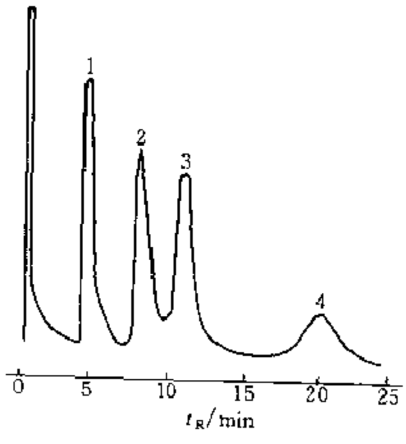


图 26-21 烷基氯化汞[21]

色谱峰：1—CH_3HgCl；2—C_2H_5HgCl；3—C_4H_7HgCl；4—$C_3H_5OC_2H_4HgCl$

色谱柱：25%丁二酸二乙二醇酯，Shimalite (30 目～60 目)，1.7m×3mm

柱 温：170℃

载 气：N_2，80ml·min^{-1}

检测器：ECD

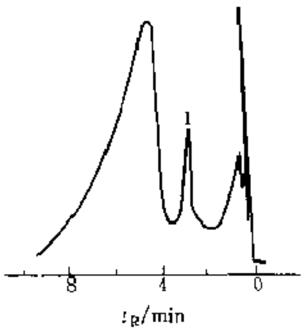


图 26-22　痕量砷（二巯基丙醇衍生物）[22]

色谱峰：1—HO—As(—S—CH_2)(—S—CH—CH_2OH)

色谱柱：3%OV-17，101 担体（60 目～80 目），2m

柱　温：200℃　　气化室温度：200℃

载　气：N_2，30ml·min^{-1}　　检测器温度：200℃

检测器：ECD

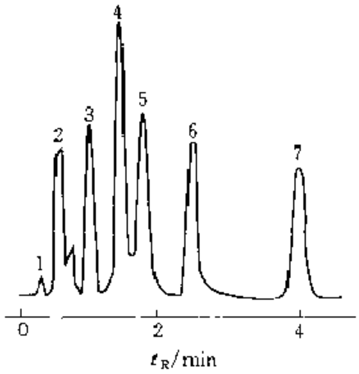


图 26-23　烷基砷化合物[18]

色谱峰：1—空气；2—AsH_3；3—CH_3AsH_2；4—$(CH_3)_2AsH$ + $C_2H_5AsH_2$；5—$(CH_3)_3As$；6—$C_3H_7AsH_2$；7—$C_4H_9AsH_2$

色谱柱：5% Carbowax 20M，Chromosorb 101（80 目～100 目）；2.50m×0.5mm

柱　温：175℃　　载　气：Ar，100ml·min^{-1}

检测器：微波发射分光计［波长 228.8nm，（5～20）×101325/760Pa］

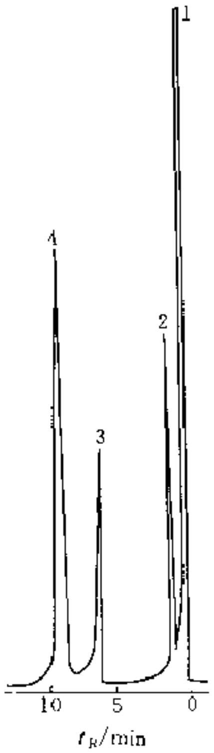


图 26-24　甲基氯化锡[23]

色谱峰：1—溶剂；2—三甲基氯化锡；3—甲基三氯化锡；4—二甲基二氯化锡

色谱柱：5%OV-225＋1%司班-60，Chromosorb W AW-DMCS（60 目～80 目），2m×3mm

柱　温：100℃　　气化室温度：220℃

载　气：H_2，55ml·min^{-1}　　检测器温度：170℃

检测器：TCD

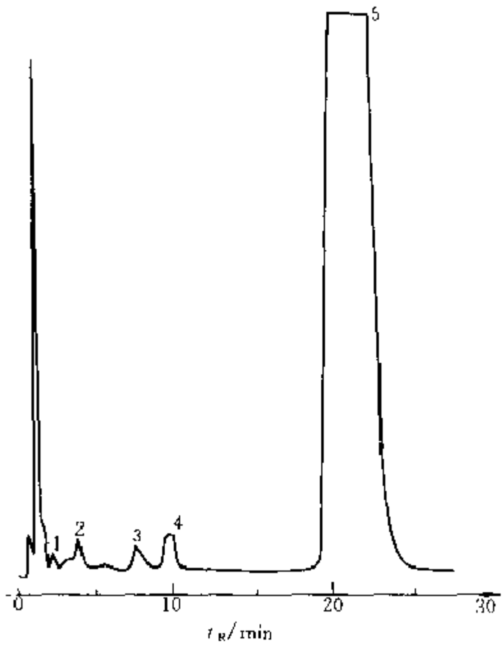


图 26-25　四丁基锡（甲基化衍生物）[24]

色谱峰：1—丁基三甲基锡；2—二丁基二甲基锡；3—未定；4—三丁基一甲基锡；5—四丁基锡

色谱柱：20%SE-30，102 担体（60 目～80 目）

柱　温：200℃

载　气：N_2

检测器：FID

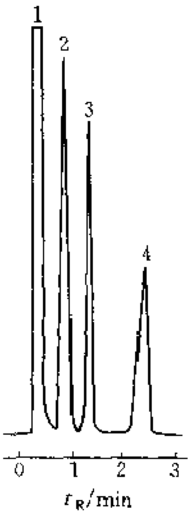


图 26-26　烷基金属化合物[25]

色谱峰：1—n-C_7H_{16}；2—$Sb(C_2H_5)_3$；3—$Sn(C_2H_5)_4$；4—$Pt(C_2H_5)_4$

色谱柱：85% 石蜡 + 15% 三苯胺，Chromosorb W（60 目～80 目），1m×4mm

柱　温：143℃

载　气：He，44ml・min^{-1}

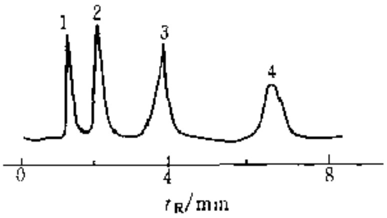


图 26-27　羰基金属化合物[26]

色谱峰：1—$Fe(CO)_5$；2—$Cr(CO)_6$；3—$Mo(CO)_6$；4—$W(CO)_6$

色谱柱：25% 角鲨烷，Chromosorb P AW（80 目～100 目），1.00m×2mm

柱　温：90℃

载　气：He，33ml・min^{-1}

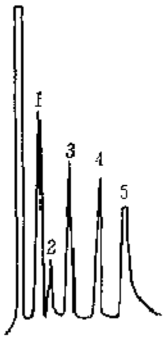


图 26-28　螯合物（三氟甲基叔戊酰基甲烷螯合物）[27]

色谱峰：1—Al(Ⅰ)；2—Al(Ⅱ)；3—Sc；4—Fe；5—Cr

色谱柱：将 301 釉化担体先用 Chromosorb W 涂层，用量为其 1/5，然后用 PEG-20M 涂渍，制成固定相

柱　温：200℃

载　气：N_2，25ml・min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：200℃

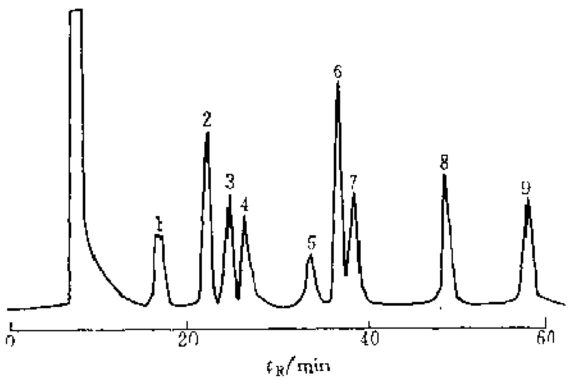


图 26-29　螯合物（二[三氟乙基]二硫代氨基甲酸酯衍生物）[28]

色谱峰：1—锌；2—铜；3—镍；4—镉；5—汞；6—钴；7—铁；8—铅；9—铋

色谱柱：3% OV-25，Chromosorb W HP（100 目～120 目），0.90m×2mm

柱　温：120℃→210℃，2℃・min^{-1}

载　气：N_2，35ml・min^{-1}　　气化室温度：210℃

检测器：FID　　检测器温度：210℃

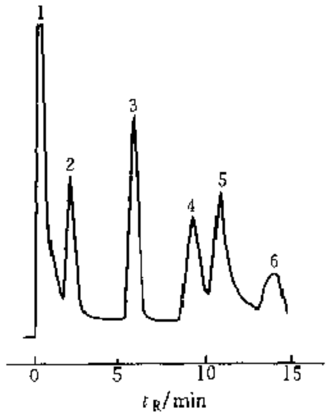


图 26-30　螯合物（三氟乙酰丙酮酸衍生物）（一）[29]

色谱峰：1—苯；2—铍；3—铝；4—钪；5—铟；6—铑

色谱柱：0.5% DC-710，玻璃球（60 目～70 目），1.2m

柱　温：100℃→135℃，3℃・min^{-1}

载　气：He，83 ml・min^{-1}

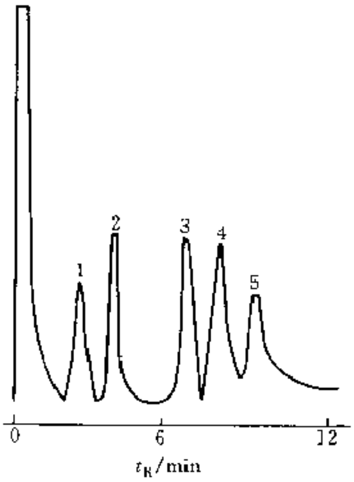


图 26-31　螯合物(三氟乙酰丙酮酸衍生物)(二)[30]

色谱峰：1—铊；2—铍；3—铝；4—镓；5—铟

色谱柱：0.5%硅油 710，玻璃珠（60 目～80 目），1.22m×4mm

柱　温：85℃→160℃，7.9℃・min^{-1}

载　气：He，79 ml・min^{-1}

检测器：TCD

气化室温度：175℃

检测器温度：150℃

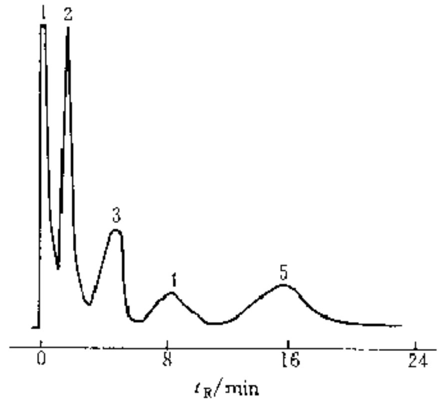


图 26-32　螯合物(三氟乙酰丙酮酸衍生物)(三)[31]

色谱峰：1—苯；2—铝；3—铬；4—铑；5—锆

色谱柱：0.5%硅油，玻璃珠（60 目～80 目），1.2m

柱　温：135℃

载　气：He，130 ml・min^{-1}

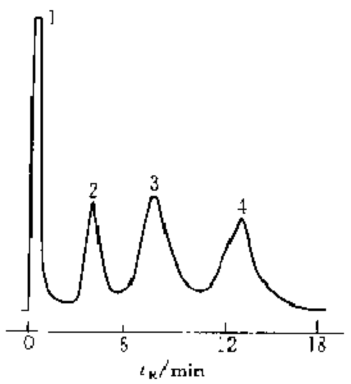


图 26-33　螯合物(三氟乙酰丙酮酸衍生物)(四)[30]

色谱峰：1—苯；2—铝；3—镓；4—铟

色谱柱：0.5% DC-710，玻璃球（60 目～80 目），1.2m

柱　温：120℃

载　气：He，120 ml・min^{-1}

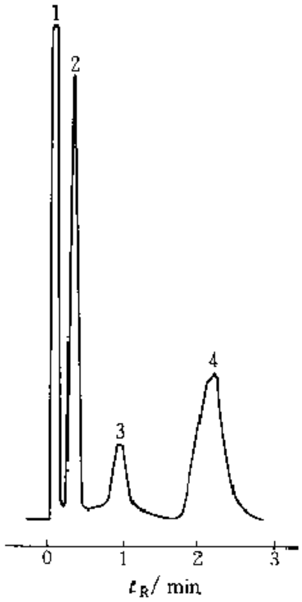


图 26-34　螯合物(乙酰丙酮酸衍生物)(一)[32]

色谱峰：1—四氯化碳；2—铍；3—铝；4—铬

色谱柱：7.5% SE 30，耐火砖（40 目～60 目），1.52m×3mm

柱　温：165℃

载　气：N_2

检测器：FID

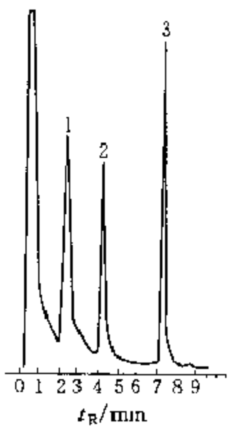


图 26-35　螯合物(乙酰丙酮酸衍生物)(二)[33]

色谱峰：1—铍；2—铝；3—铬

色谱柱：5% OV-17，Chromosorb W（80 目～100 目），1m×4mm

柱　温：190℃→250℃，8℃・min^{-1}

载　气：Ar，60ml・min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：230℃～250℃

检测器温度：250℃

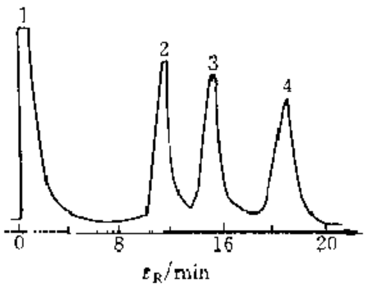


图 26-36　螯合物(单硫代乙酰丙酮酸衍生物)[35]
色谱峰：1　三氯甲烷；2—钴；3—镍；4—钯
色谱柱：5% Apiezon，Universal B (60 目～80 目)，0.90m
柱　温：170℃～220℃　　载　气：N_2，120ml・min^{-1}

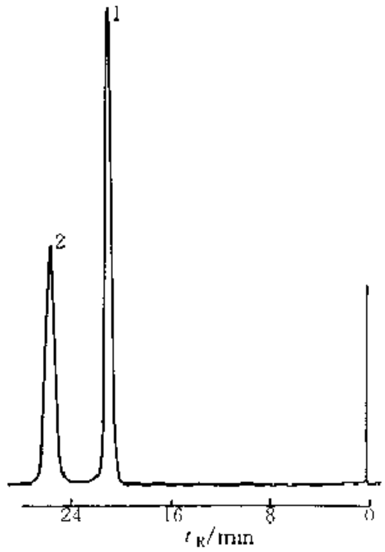


图 26-37　钯和铂(二异丙基二硫代磷酸盐)[16]
色谱峰：1—钯；2—铂　　柱　温：170℃
色谱柱：PS-300，10m　　检测器：FPD-硫型

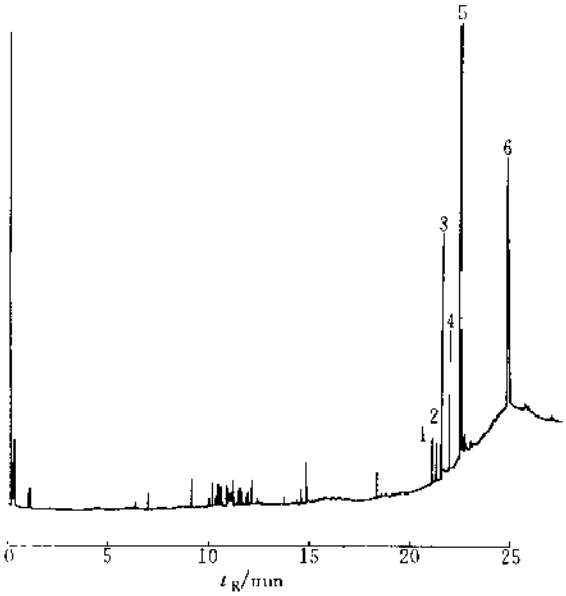
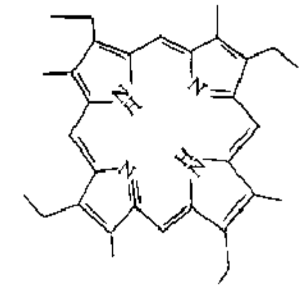
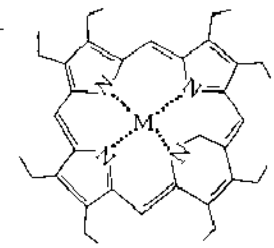


图 26-38　金属络合卟啉[37]
色谱柱：HT5，12m×0.32mm，d_f=0.10μm
柱　温：60℃→430℃ (5min)，20℃・min^{-1}
　　　　及 10℃・min^{-1}
检测器：FID
进样方式：柱头进样

色谱峰：1 -



2～5—



其中，2—M=TiO；3—M=Cu；
　　　4—M=VO；5—M=Pd

6—

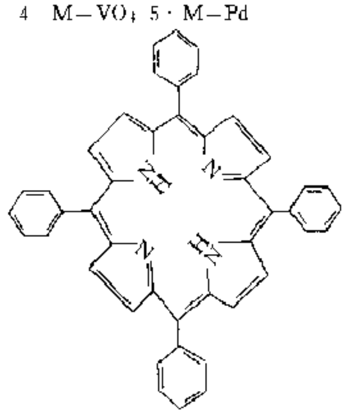




图 26-39 微量铍与铬(TFA 螯合物)[34]

色谱峰：1—铍；2—铬

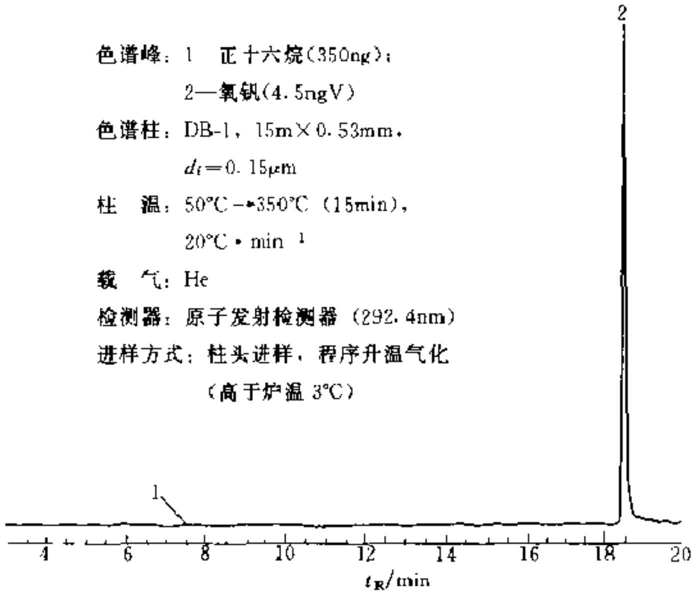
色谱柱：OV 17，27m×0.3mm

柱　温：160℃

检测器：ECD

气化室温度：190℃

检测器温度：190℃



色谱峰：1　正十六烷(350ng)；

2—氧钒(4.5ngV)

色谱柱：DB-1，15m×0.53mm，

d_f=0.15μm

柱　温：50℃→350℃（15min），

20℃·min^{-1}

载　气：He

检测器：原子发射检测器（292.4nm）

进样方式：柱头进样，程序升温气化

（高于炉温 3℃）

图 26-40 氧钒(八乙基卟啉螯合物)[40]

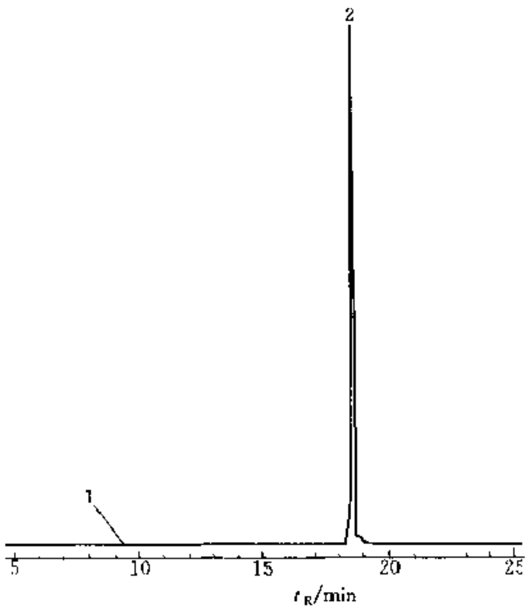


图 26-41 镍(八乙基卟啉螯合物)[40]

色谱峰：1　正十六烷(350ng)；2—镍(3.2ngNi)

色谱柱：DB-1，15m×0.53mm，d_f=0.15μm

柱　温：50℃→350℃（15min），20℃·min^{-1}

载　气：He

检测器：原子发射检测器（301.2nm）

进样方式：柱头进样，程序升温气化（高于炉温 3℃）

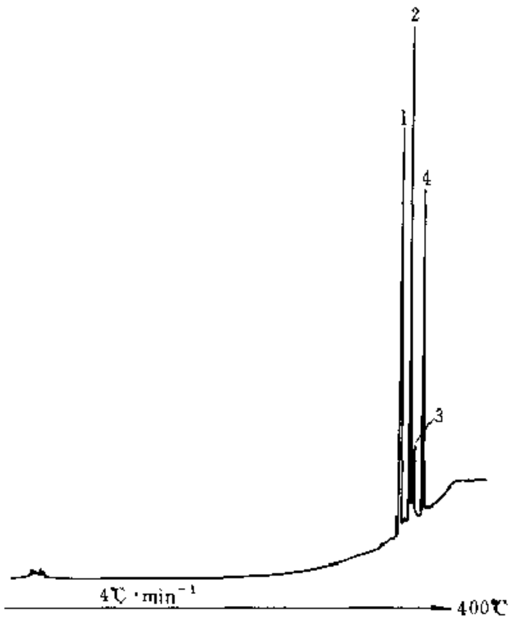


图 26-42 螯合物(八乙基卟啉螯合物)[39]

色谱峰：1—Cu；2—Ni；3—Co；4—V

色谱柱：PS-090，20m×0.3mm，d_f=0.2μm

柱　温：40℃→400℃，4℃·min^{-1}

载　气：H_2

检测器：AFI



图 26-43 螯合物(一)[38]

色谱峰：1—$(DIDTP)_2Zn$；2—$(DIDTP)_2Ni$；3—$(DIDTP)_2Pd$
色谱柱：SE 30，6.2m×0.25mm
柱　温：175℃
载　气：H_2，$\bar{u}$=52cm·s^{-1}
检测器：ECD
检测器温度：300℃

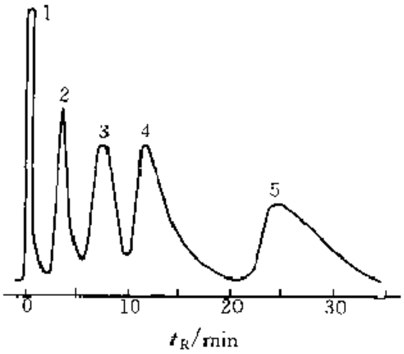


图 26-44 螯合物(二)[41]

色谱峰：1—C_6H_6；2—Sc(thd)$_3$；3—Yb(thd)$_3$；4—Ho(thd)$_3$；5—Eu(thd)$_3$
色谱柱：2% Apiezon H，Gas-Pack (60 目～80 目)，0.15m×5mm
柱　温：157℃
载　气：He，100ml·min^{-1}　气化室温度：228℃
检测器：TCD　检测器温度：232℃

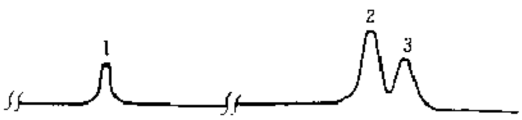


图 26-45 螯合物(三)[42]

色谱峰：1—$C_{20}H_{42}$；2—Hf(fod)$_4$；3—Zr(fod)$_4$
色谱柱：二甲基硅氧烷，30m×0.32mm
柱　温：205℃
载　气：He，$\bar{u}$=30cm·s^{-1}　气化室温度：170℃
检测器：FID　检测器温度：325℃

第二节　无机气体色谱图

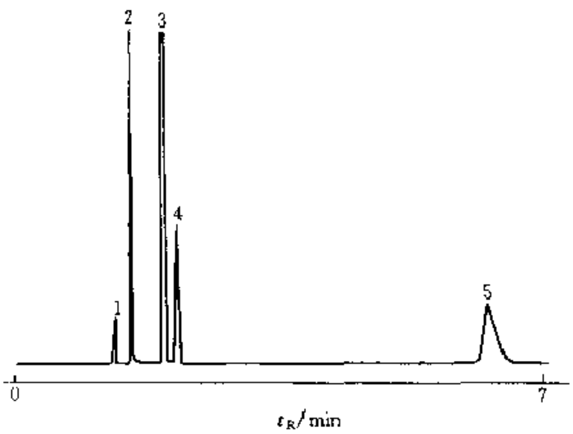


图 26-46 稀有气体[43]

色谱峰：1—Ne；2—O_2 或 Ar；3—N_2；4—Kr；5—Xe
色谱柱：GS-Molesieve，30m×0.53mm
柱　温：50℃
载　气：He，u=35 cm·s^{-1}　气化室温度：100℃
检测器：TCD　检测器温度：125℃

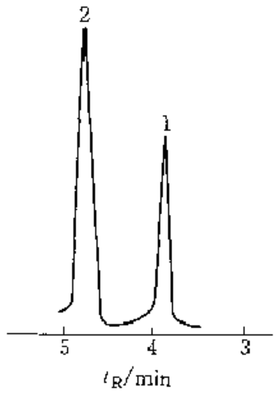


图 26-47 He 与 H_2[illegible]

色谱峰：1—氦；2—氢
色谱柱：13X 分子筛，2m　柱　温：50℃
载　气：Ar，40ml·min^{-1}　检测器：TCD

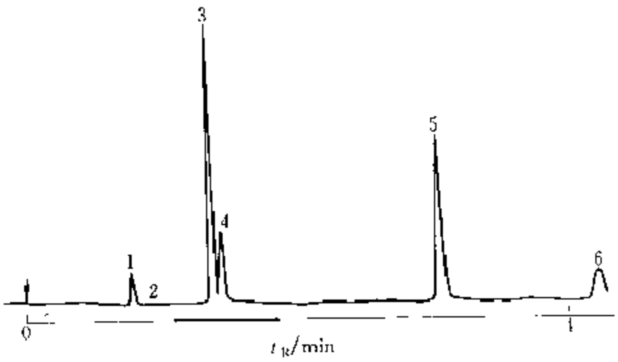


图 26-48 Ar 与 O_2[46]

色谱峰：1—He；2—Ne；3—Ar；4—O_2；5—N_2；6—CH_4
色谱柱：5A 分子筛 PLOT 柱，10m×0.32mm，d_f=30μm
柱 温：30℃ 检测器：TCD
载 气：H_2

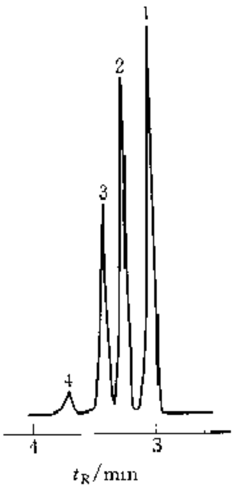


图 26-49 O_2 与 Ar[47]

色谱峰：1—N_2；2—O_2；3—Ar；4—CO
色谱柱：Hi DVB Styrene EGDMA(100 目～120 目)，8m×1.04mm
柱 温：-10℃ 载 气：He，15ml·min^{-1}

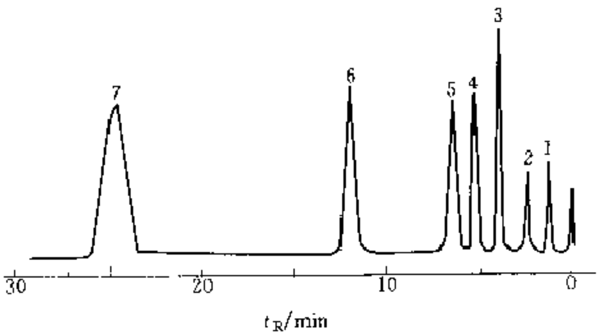


图 26-50 Kr 与 CH_4[48]

色谱峰：1—H_2；2—O_2；3—N_2；4—Kr；5—CH_4；6—CO；7—Xe
色谱柱：5A 分子筛(水含量 w=2.94%)，2m
柱 温：60℃
载 气：He，30ml·min^{-1}

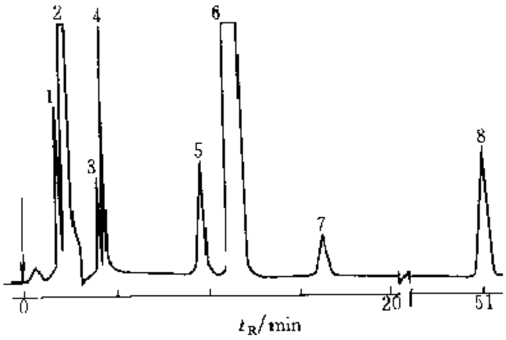


图 26-51 永久气体(一)[45]

色谱峰：1—He；2—H_2；3—Ar；4—O_2；5—Kr；6—N_2；7—CH_4；8—Xe
色谱柱：5A 分子筛，5m×4.5mm 柱 温：35℃
载 气：Ne，40ml·min^{-1} 检测器：TCD

色谱峰：1—H_2；2—N_2；3—O_2；4—Ar；5—CO
色谱柱：HayeSep A (80 目～100 目)，11m×3mm
柱 温：25℃
载 气：He，23ml·min^{-1}
检测器：TCD

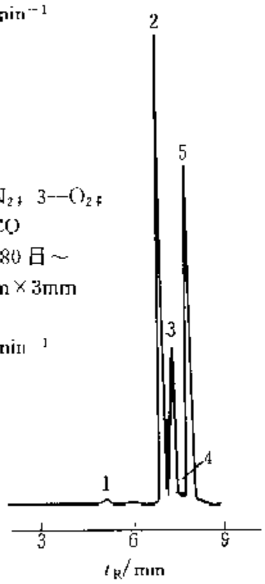


图 26-52 永久气体(二)[49]

色谱峰：1—Ne；2—O_2；3—N_2；4—CH_4；5—CO
色谱柱：GS-Molesieve，30m×0.53mm
柱 温：50℃
载 气：He，u=35cm·s
检测器：TCD
气化室温度：100℃
检测器温度：125℃

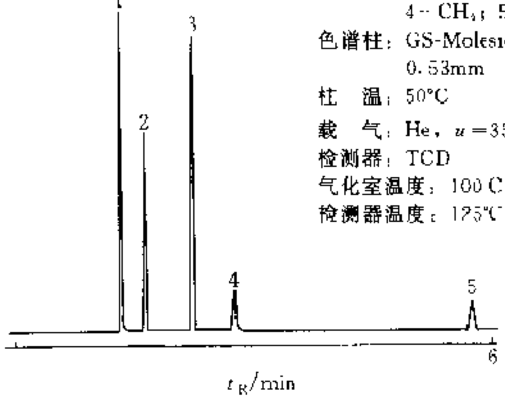


图 26-53 永久气体(三)[43]

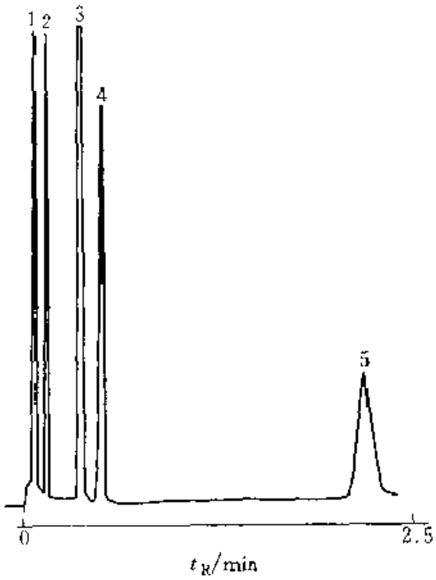


图 26-54　空气与甲烷（一）[54]

色谱峰：1—He；2—O_2；3—N_2；4—CH_4；5—CO
色谱柱：5A分子筛 PLOT 柱，10m×0.53mm，d_f=50μm
柱　温：50℃
载　气：H_2
检测器：TCD

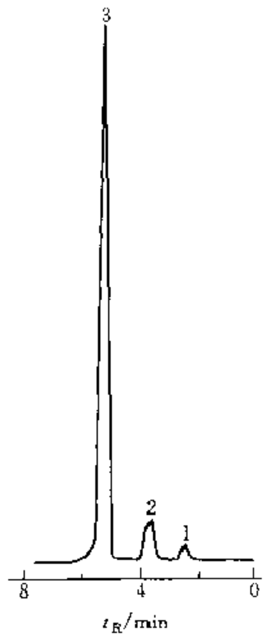


图 26-55　空气与甲烷（二）[54]

色谱峰：1—氧；2—氮；3—甲烷
色谱柱：13X 分子筛(60 目～80 目)，2m
载　气：N_2，30ml·min^{-1}
检测器：TCD

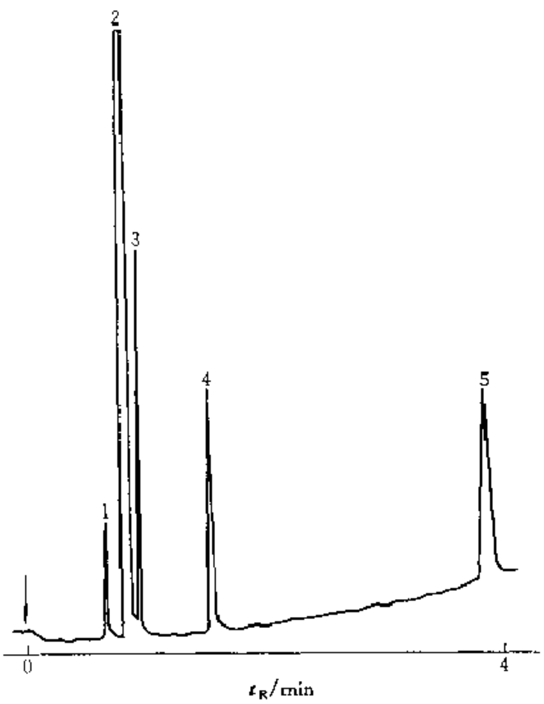


图 26-56　空气中一氧化碳[54]

色谱峰：1—He；2—空气；3—CO；4—CH_4；5—CO_2
色谱柱：CarboPLOT P7，10m×0.53mm，d_f=30μm
柱　温：30℃→75℃，10℃·min^{-1}
载　气：H_2，20kPa
检测器：TCD
气化室温度：30℃
检测器温度：200℃

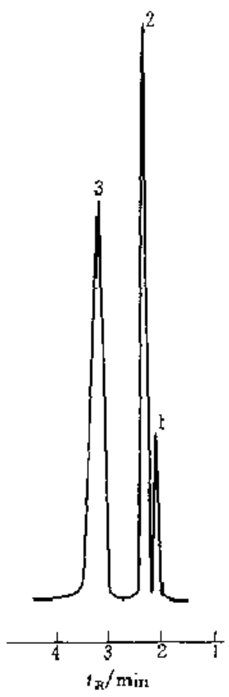


图 26-57　催化、分离测定氧[54]

色谱峰：1—Ar；2—N_2；3—O_2^*(即 H_2O)
(TDX 02 涂钯柱将 O_2 转化为 H_2O 并进行分离)
色谱柱：TDX-01 柱 2.1m × 3mm 与 TDX-02 涂 Pd 柱 0.20m×3mm 串联
柱　温：34℃
载　气：H_2，80ml·min^{-1}
检测器：TCD

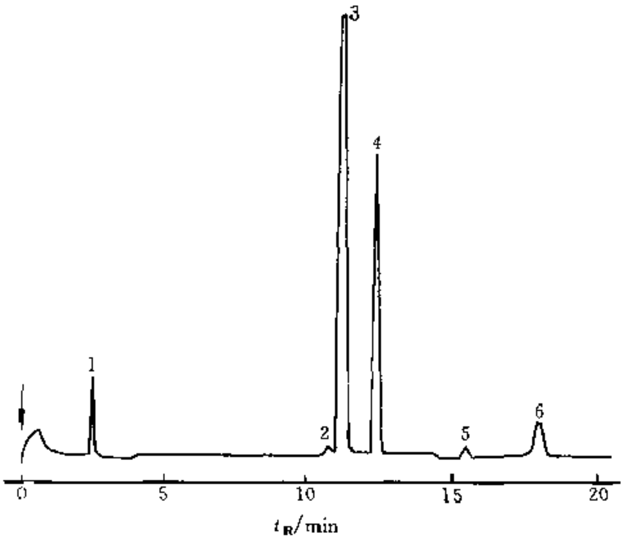


图 26-58　CO_2[55]

色谱峰：1—H_2；2—O_2；3—N_2；4—CO；5—CH_4；6—CO_2

色谱柱：Carbosieve S-Ⅱ，3.05m

柱　温：−10℃(5min)→50℃，10℃·min^{-1}→250℃，30℃·min^{-1}

载　气：He

检测器：TCD

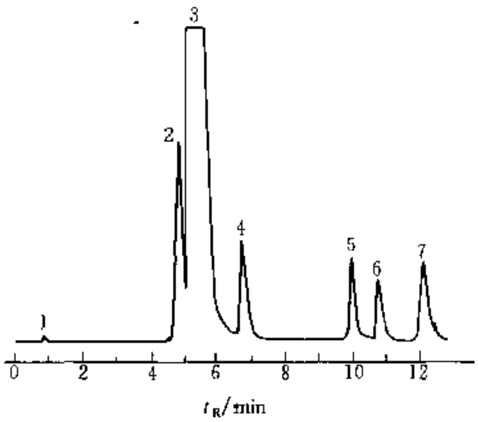


图 26-59　H_2O 与 CO_2[56]

色谱峰：1—H_2；2—O_2；3—N_2；4—CO；5—CH_4；6—H_2O；7—CO_2

色谱柱：Carbosieve S(100 目～120 目)，2.1m×3mm

柱　温：35℃(4min)→175℃，25℃·min^{-1}

载　气：He，40ml·min^{-1}

检测器：TCD

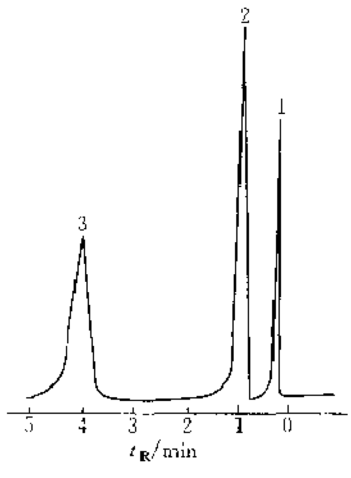


图 26-60　甲烷中氢气[52]

色谱峰：1—H_2；2—O_2；3—CH_4

色谱柱：TDX-01(80 目～100 目)，1m×2mm

柱　温：80℃

载　气：N_2

检测器：TCD

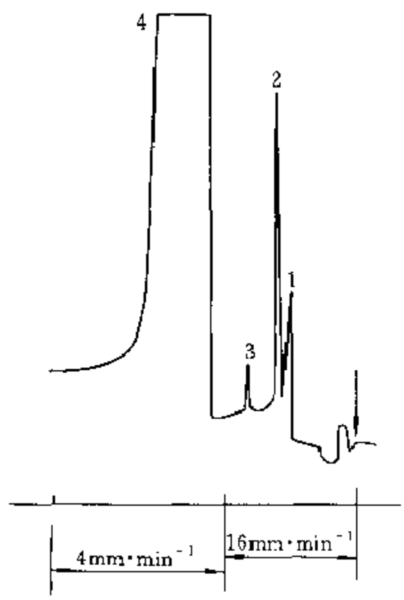


图 26-61　乙烯中微量氢[52]

色谱峰：1—氢气；2—空气；3—甲烷；4—乙烯

色谱柱：有机担体 407(80 目～100 目)，2m×3mm

柱　温：50℃

载　气：氮

检测器：TCD

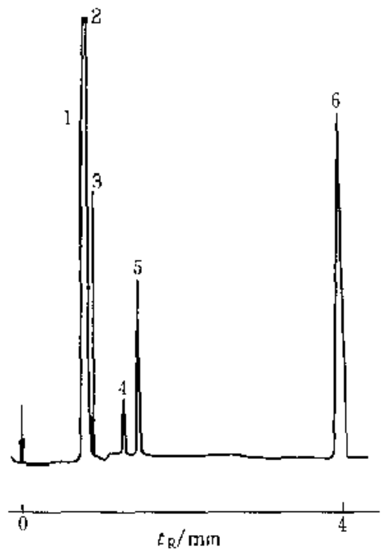


图 26-62 N_2O 与 H_2S

色谱峰：1—He；2—$CO+O_2$；3—CH_4；4—CO_2；5—N_2O；6—H_2S

色谱柱：PoraPLOT Q，10m×0.32mm，d_f=10μm

柱 温：30℃

载 气：H_2，40kPa

检测器：TCD

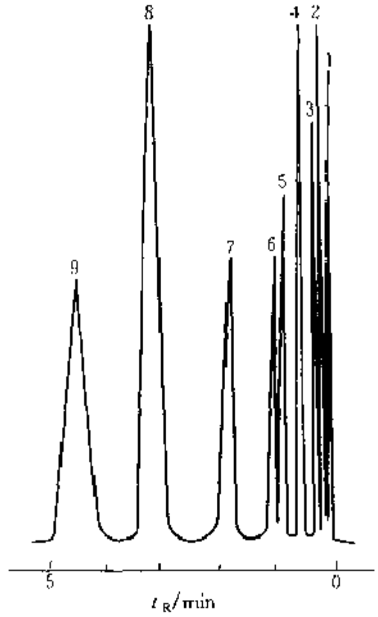


图 26-63 永久气体与烃(一)[57]

色谱峰：1—H_2；2—O_2；3—CO；4—甲烷；5—H_2O；6—CO_2；7—乙炔；8—乙烯；9—乙烷

色谱柱：碳分子筛，0.5m×4mm 载 气：N_2

柱 温：100℃ 检测器：TCD

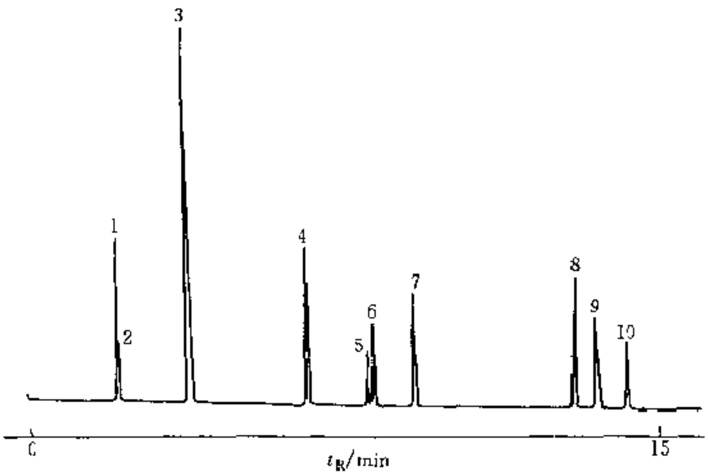


图 26-64 永久气体与烃(二)[60]

色谱峰：1—N_2；2—O_2；3—甲烷；4—CO_2；5—乙烯；6—乙炔；7—乙烷；8—丙烯；9—丙烷；10—丙炔

色谱柱：PoraPLOT Q，25m×0.32mm

柱 温：−50℃(1.5min)→150℃，20℃·min^{-1}

载 气：H_2

检测器：TCD

第三节　同位素化合物色谱图

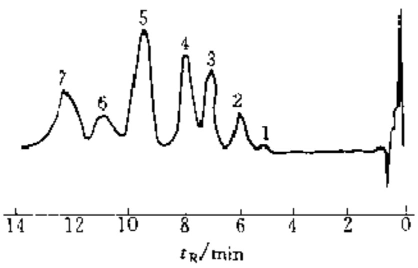


图 26-65　氢同位素(一)[59]

色谱峰：1—p-H_2；2—o-H_2；3—HD；4—HT；5—D_2；6—DT；7—T_2

色谱柱：4A 分子筛（250℃ 活化），2m×2mm

柱　温：−148℃

载　气：He，80ml・min^{-1}

检测器：TCD



图 26-66　氢同位素(二)[60]

色谱峰：1—H_2；2—HD；3—D_2

色谱柱：5%Fe^{3+}涂于4A分子筛（在175℃活化2h），4m×2.16mm

柱　温：－196℃(液氮)

载　气：He，79 ml・min^{-1}

检测器：TCD

检测器温度：150℃

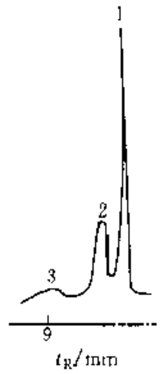


图 26-67　氢同位素(三)[60]

色谱峰：1—H_2；2—HT；3—T_2

色谱柱：5%Fe^{3+}涂于4A分子筛（在175℃活化2h），4m×2.16mm

柱　温：－196℃(液氮)

载　气：He，79 ml・min^{-1}

检测器：TCD

检测器温度：150℃

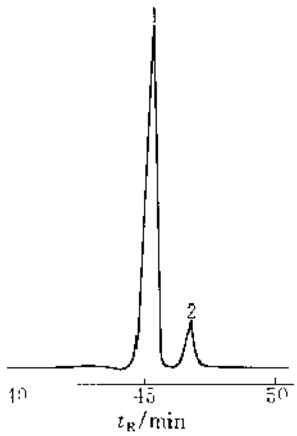


图 26-68　氖同位素[61]

色谱峰：1—Ne^{20}；2—Ne^{22}

色谱柱：NaOH 腐蚀的空心柱，82m×0.28mm

柱　温：19K

载　气：95% He－5%H_2

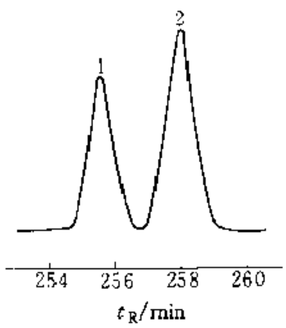


图 26-69　氧同位素[62]

色谱峰：1—O_2^{16}；2—O_2^{18}

色谱柱：用20% NaOH 于100℃处理6h的空心柱，173m×0.3mm

柱　温：77K

载　气：65% N_2－35%He

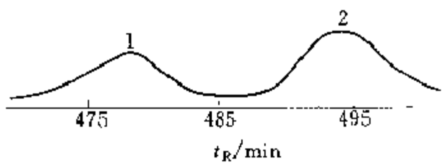


图 26-70　氮同位素[63]

色谱峰：1—$^{14}N_2$；2—$^{15}N_2$

色谱柱：1.0% 角鲨烷，石墨化炭黑，60m×4mm

柱　温：77K

载　气：H_2+CO，75ml・min^{-1}

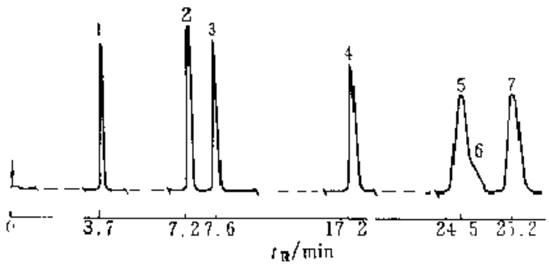


图 26-71 甲烷同位素[45]

色谱峰：1—He；2—Ar；3—O_2；4—N_2；5—CD_4；6—CHD_3；7—CH_4

色谱柱：5A 分子筛 PLOT 柱，75m×0.32mm

柱 温：22.3℃ 检测器：TCD

载 气：H_2

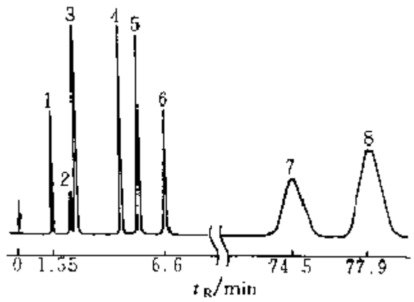


图 26-72 乙烷同位素[64]

色谱峰：1—He；2—Ar；3—O_2；4—N_2；5—Kr；6—CH_4；7—C_2D_6；8—C_2H_6

色谱柱：5A 分子筛 PLOT 柱(30μm)，25m×0.32mm

柱 温：44.5℃ 检测器：TCD

载 气：H_2

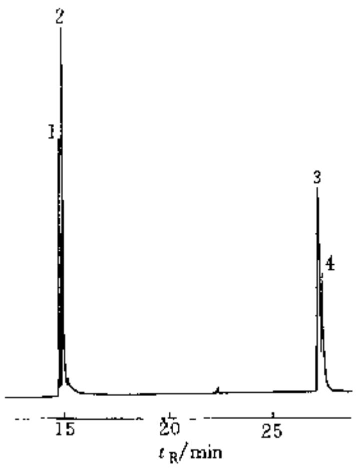


图 26-73 环己烷与苯的同位素[65]

色谱峰：1—$C_{12}D_{12}$；2—$C_{12}H_{12}$；3—C_6H_6；4—C_6D_6

色谱柱：钠玻璃毛细管(用 1mol·L^{-1}NaOH 于 50℃ 处理 48h)，70.5m×0.97mm

柱 温：30℃ (1min) →110℃，4℃·min^{-1}

载 气：Ar 检测器：FID

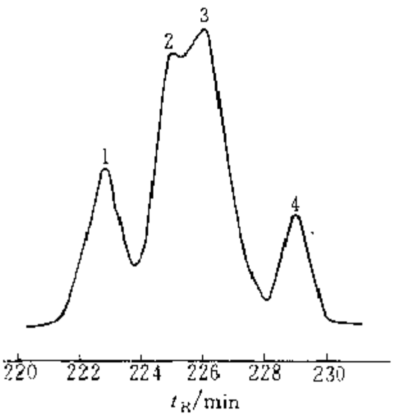


图 26-74 苯同位素[66]

色谱峰：1—C_6D_6；2—$C_6H_2D_4$；3—$C_6H_3D_3$；4—C_6H_6

色谱柱：角鲨烷，250m×0.28mm

柱 温：10℃

载 气：N_2，0.25ml·min^{-1}

第四节　对映体化合物色谱图

色谱峰：1--2-庚醇；2—3-辛醇；3—2-辛醇；4—2-壬醇；
5—2.6 二甲基-2.7-二烯-4-辛醇；6—α-萜品醇；
7—薄荷醇；8　2-癸醇

色谱柱：XE-60-S-缬氨酰-S-α-苯乙胺，40m×0.32mm　　载　气：H_2

柱　温：120℃　　检测器：FID

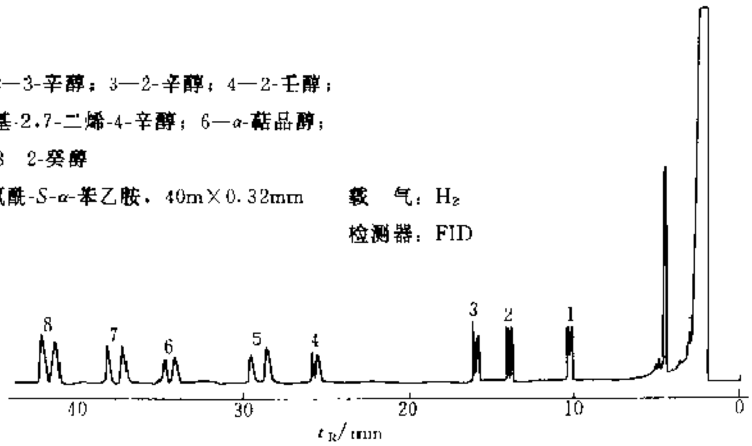
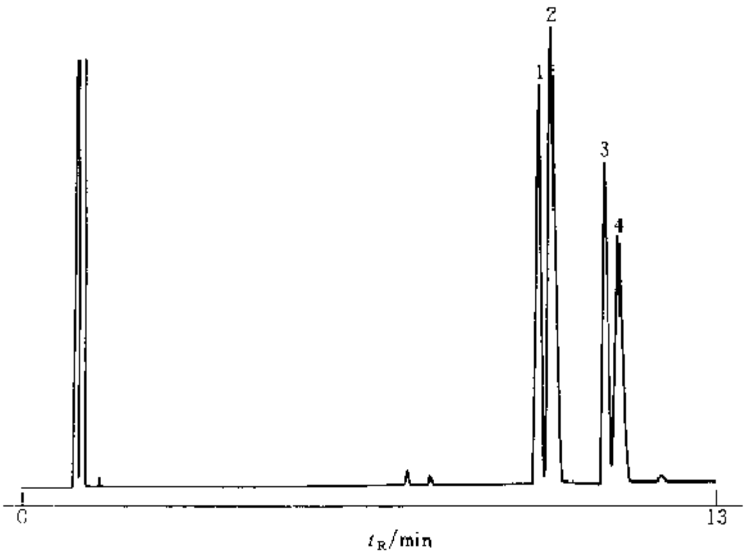


图 26-75　手性醇[67]



色谱峰：1—(+)-新薄荷醇；2—(−)-新薄荷醇；3—(+)-薄荷醇；4—(−)-薄荷醇

色谱柱：Cyclodex-B，30m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱　温：105℃

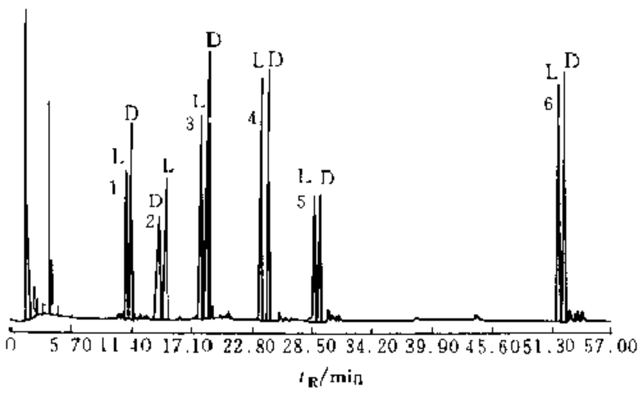
载　气：H_2，$\bar{u}$=55cm·s^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：300℃

图 26-76　薄荷醇对映体[68]



色谱峰：1—丙氨醇；2—脯氨醇；3—缬氨醇；4—苏氨醇；5—亮氨醇；6—苯丙氨醇

色谱柱：Chirasil-L-Val　1∶5，20m×0.3mm

柱　温：60℃ (15min) → 80℃ (15min)，4℃·min^{-1} → 110℃ (15min)，4℃·min^{-1}

载　气：He，50kPa

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：250℃

图 26-77　氨基醇对映体（全氟酰化衍生物）[69]

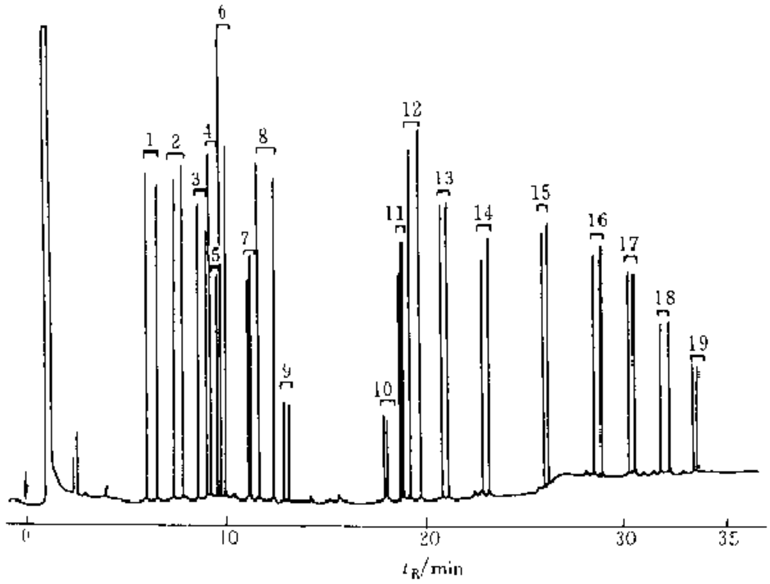


图 26-78　氨基酸对映体（PFP-异丙基酯衍生物）[79]

色谱峰：1—丙氨酸；2—缬氨酸；3—苏氨酸；4—异白氨酸；5—甘氨酸；6—异白氨酸；7—脯氨酸；8—白氨酸；9—丝氨酸；10—半胱氨酸；11—门冬氨酸；12—蛋氨酸；13—苯丙氨酸；14—谷氨酸；15—酪氨酸；16—鸟氨酸；17—胱氨酸；18—精氨酸；19—色氨酸（D 对映体先流出）

色谱柱：Chirasil-L Val，25m×0.22mm

柱　温：80°C(3min)→190°C，$4°C \cdot min^{-1}$

载　气：H_2

检测器：FID

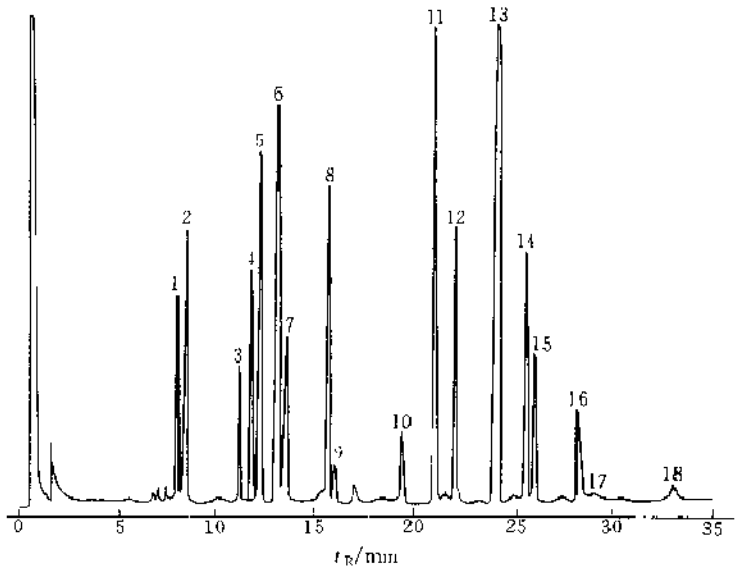


图 26-79　大豆蛋白质水解产物[7..]

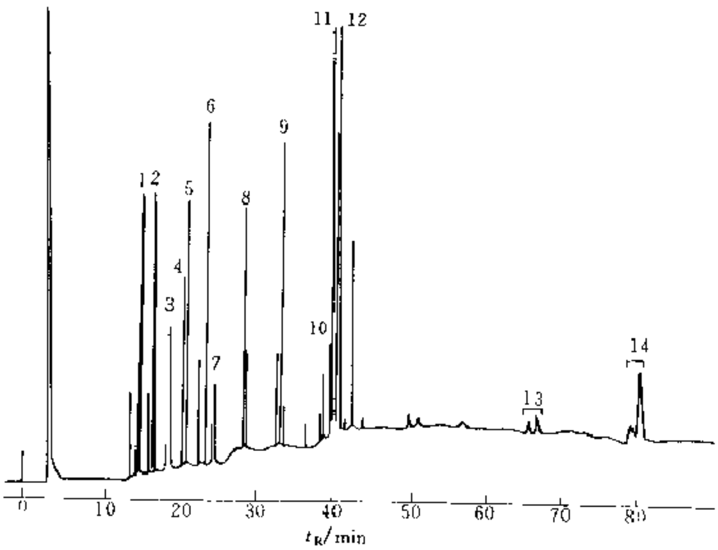
色谱峰：1—丙氨酸；2—甘氨酸；3—缬氨酸；4—苏氨酸；5—丝氨酸；6—亮氨酸；7—异亮氨酸；8—脯氨酸；9—胱氨酸；10—蛋氨酸；11—天冬氨酸；12—苯丙氨酸；13—谷氨酸；14—赖氨酸；15—酪氨酸；16—精氨酸；17—组氨酸；18—色氨酸

色谱柱：Heliflex Amino Acid，25m×0.53mm

柱　温：80°C(2min)→230°C，$4°C \cdot min^{-1}$

载　气：He，$10ml \cdot min^{-1}$

检测器：FID



色谱峰：1—D,L-丙氨酸；2—D,L-缬氨酸；3—D,L-苏氨酸；4—L-异亮氨酸；5—L-甘氨酸；6—D,L-亮氨酸；7—D,L-丝氨酸；8—L-脯氨酸；9—D,L-天冬氨酸；10—D,L-蛋氨酸；11—D,L-谷氨酸；12—D,L-苯丙氨酸；13—D,L-鸟氨酸；14—D,L-赖氨酸

色谱柱：OV-225-L-缬氨酰叔丁胺，20m×0.25mm

柱　温：100℃(10min)→190℃，3℃·min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FID

图 26-80　豆腐黄浆水中氨基酸对映体(酯化衍生物)[72]

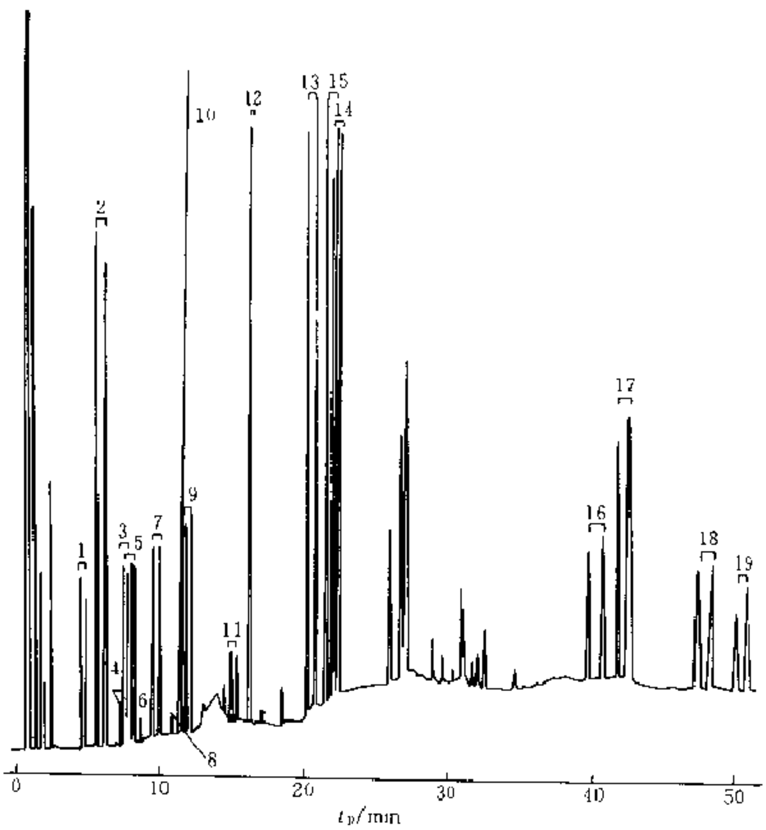


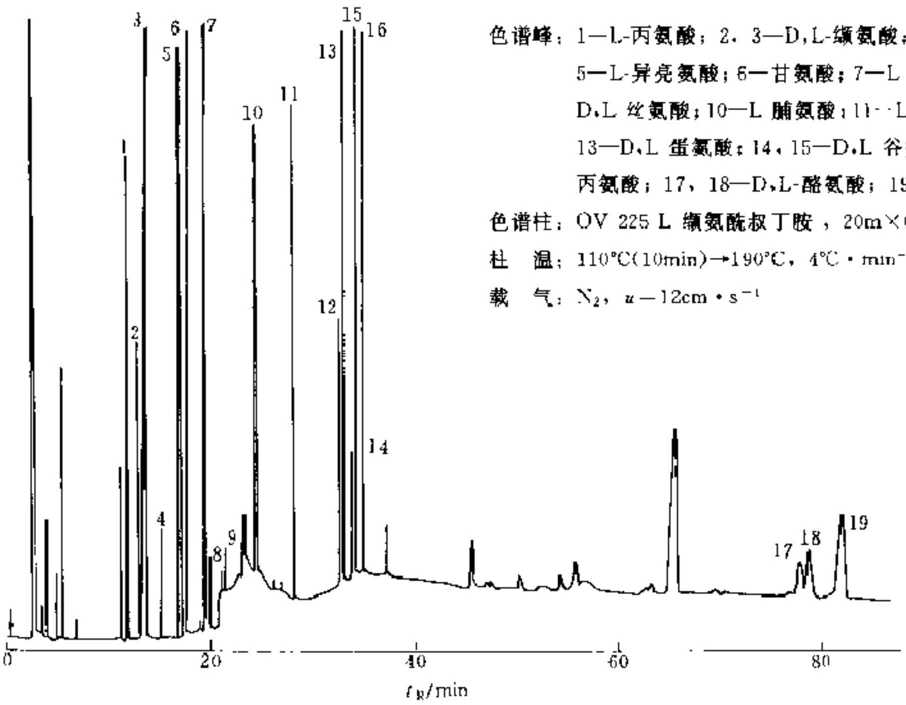
图 26-81　氨基酸对映体(酯化衍生物)[73]

色谱峰❶：1—丙氨酸；2—缬氨酸；3—苏氨酸；4—别异亮氨酸；5—异亮氨酸；6—甘氨酸；7—亮氨酸；8—正亮氨酸；9—丝氨酸；10—脯氨酸；11—胱氨酸；12—天冬氨酸；13—蛋氨酸；14—谷氨酸；15—苯丙氨酸；16—鸟氨酸；17—酪氨酸；18—赖氨酸；19—色氨酸

❶D型先流出，L型后流出。

色谱柱：OV-225 L 缬氨酰叔丁胺，20m×0.25mm　　载　气：N_2

柱　温：100℃(6min)→190℃，4℃·min^{-1}　　检测器：FID



色谱峰：1—L-丙氨酸；2，3—D,L-缬氨酸；4—L-苏氨酸；5—L-异亮氨酸；6—甘氨酸；7—L-亮氨酸；8，9—D,L-丝氨酸；10—L-脯氨酸；11—L-天冬氨酸；12，13—D,L-蛋氨酸；14，15—D,L-谷氨酸；16—L-苯丙氨酸；17，18—D,L-酪氨酸；19—L-赖氨酸

色谱柱：OV 225 L-缬氨酰叔丁胺，20m×0.25mm

柱　温：110℃(10min)→190℃，4℃·min^{-1}

载　气：N_2，$u=12cm\cdot s^{-1}$

图 26-82　海参中氨基酸对映体(酯化衍生物)[74]

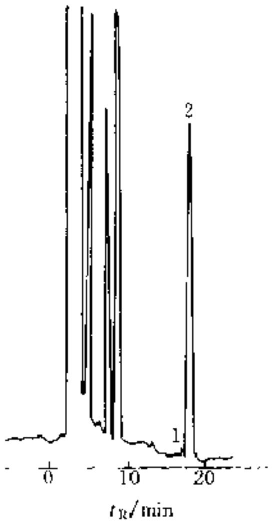


图 26-83　牙本质中天冬氨酸对映体(TFA 衍生物)[75]

色谱峰：1—D-天冬氨酸；2—L-天冬氨酸

色谱柱：交联乙烯基氰乙基聚硅氧烷 L-缬氨酰叔丁胺，25m×0.25mm

柱　温：127℃

载　气：N_2

检测器：FID

检测器温度：220℃

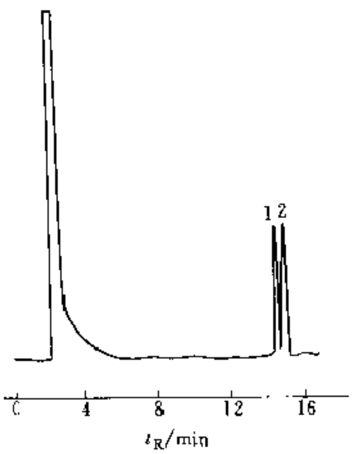


图 26-84　硒蛋氨酸对映体(TFA 衍生物)[76]

色谱峰：1—D-硒蛋氨酸；2—L-硒蛋氨酸

色谱柱：OV 225 L-缬氨酸叔丁基酰胺，29m×0.25mm

柱　温：160℃

载　气：N_2

检测器：FID

气化室温度：220℃

检测器温度：220℃

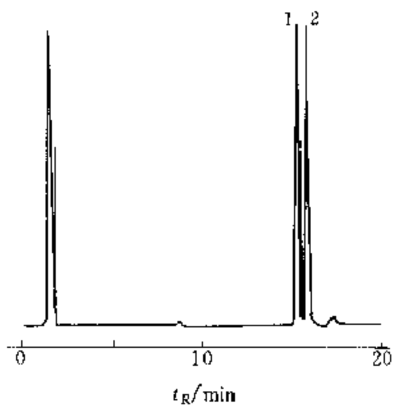


图 26-85　苯乙烯化氧对映体

色谱峰：1—(+)-苯乙烯化氧；2—(-)-苯乙烯化氧

色谱柱：Cyclodex-B，30m×0.25mm，$d_f=0.25\mu m$

柱　温：80℃

载　气：H_2，1.1ml·min^{-1}

检测器：FID

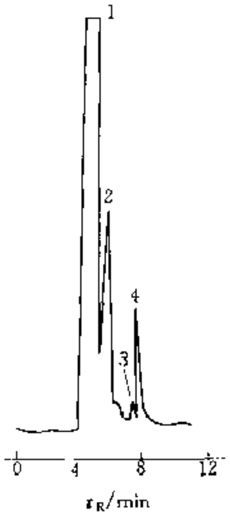


图 26-86 环氧化物对映体[78]

色谱峰：1—二氯甲烷；2—3-氯-1-丙烯；3—(*R*) 1-氯-2,3-环氧丙烷；4—(*S*)-1-氯-2,3-环氧丙烷

色谱柱：2,6-*O* 二戊基-3-*O*-三氟乙酰基-*β*-环糊精，40m×0.25mm

柱　温：100℃

载　气：N_2

检测器：FID

气化室温度：200℃

检测器温度：250℃

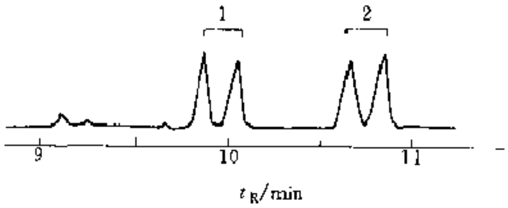


图 26-87 胺类对映体（*N*-HFB-L-PCl 衍生物）[79]

色谱峰：1—(＋/－) 甲基苯丙胺；2-（＋/－)-*N*-正丙基苯丙胺

色谱柱：HP-1，12m，d_f＝0.25μm

柱　温：120℃(1min)→275℃，10℃・min^{-1}

载　气：He

检测器：MS

气化室温度：250℃

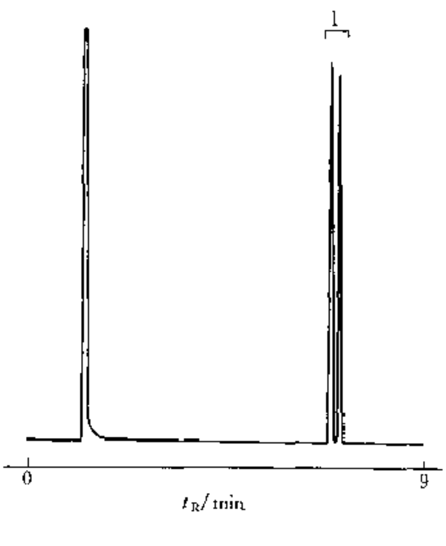


图 26-88 乙琥胺对映体[80]

色谱峰：1—(±)-乙琥胺

色谱柱：Cyclodex B，30m×0.25mm，d_f＝0.25μm

柱　温：160℃

载　气：H_2，66cm・s^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：300℃

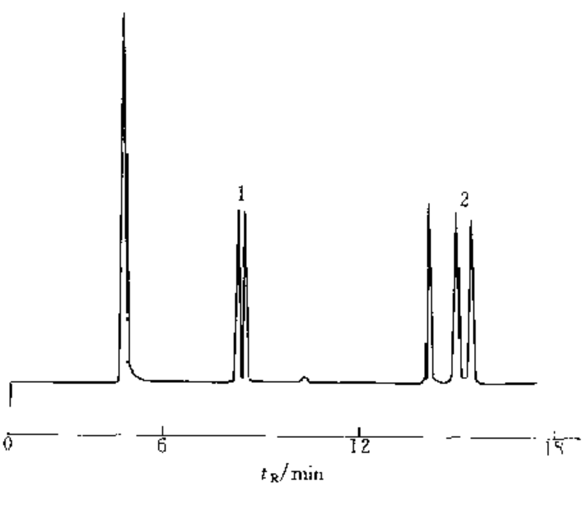


图 26-89 溴代烷对映体[81]

色谱峰：1—2-溴丁烷；2—2-溴戊烷

色谱柱：*β*-环糊精衍生物 SCOT 柱（Celite 载体），43m×0.28mm

柱　温：50℃

载　气：N_2

检测器：FID

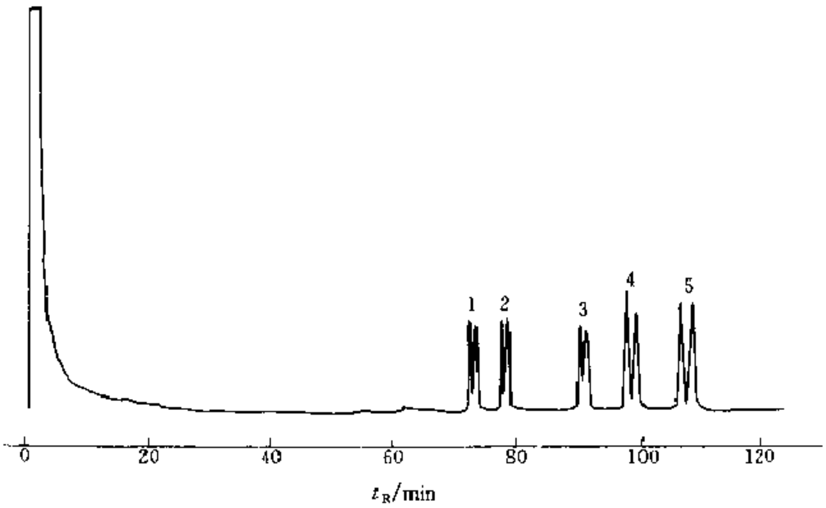
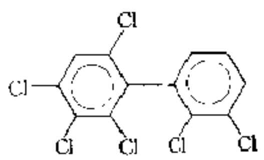
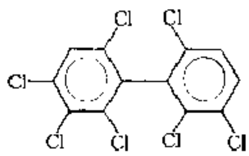


图 26-90　多氯联苯对映体[82]

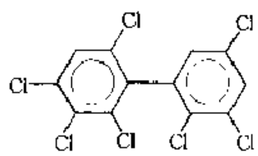
色谱峰：1—



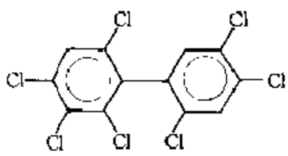
2—



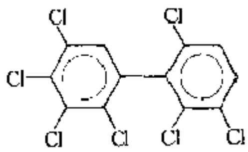
3—



4



5—



色谱柱：50%2,3-Me-6-Tx-β-CD 于 OV-1701，15m

柱　温：120℃ →150℃，0.5℃·min^{-1}

载　气：H_2，0.6 bar

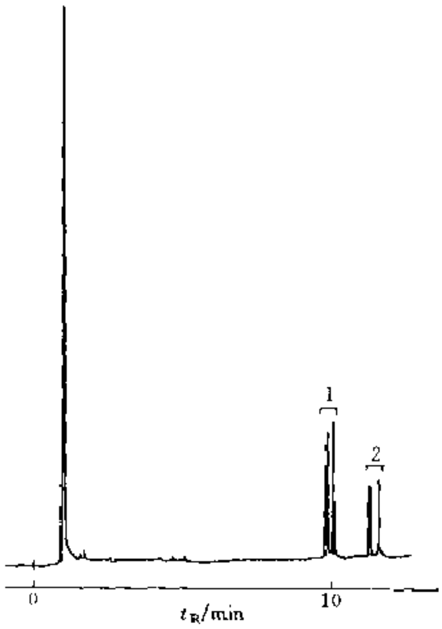


图 26-91 巴比妥类对映体(一)[83]

色谱峰：1—(+/−)六巴比妥；2—(+/−)甲基巴比妥
色谱柱：CYDEX-B，25m×0.22mm，d_f=0.25μm
柱 温：200℃(2min)→230℃(1min)，3℃·min^{-1}
检测器：FID

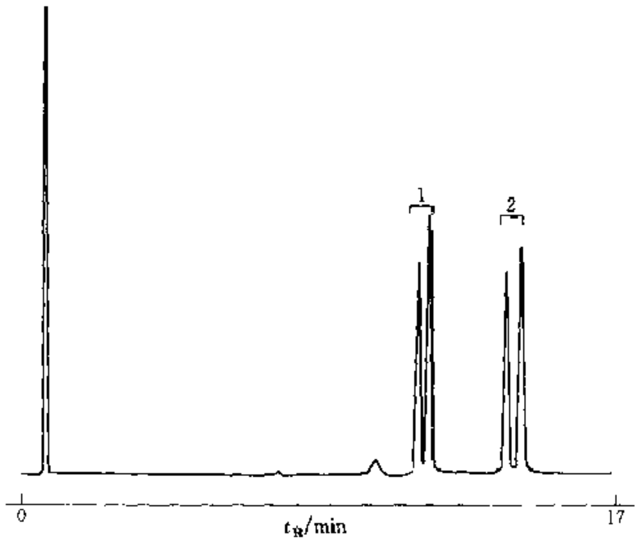


图 26-92 巴比妥类对映体（二）[30]

色谱峰：1—环己巴比妥；2—甲基苯巴比妥
色谱柱：Cyclodex-B，30m×0.25mm，d_f=0.25μm
柱 温：200℃
载 气：H_2，$\bar{u}$=46cm·s^{-1}
检测器：FID
气化室温度：250℃
检测器温度：300℃

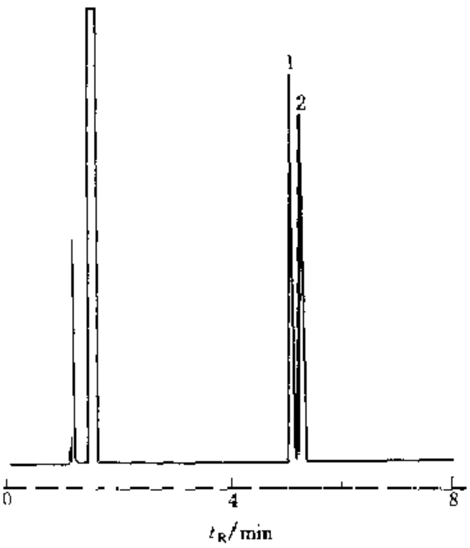


图 26-93 α-蒎烯对映体[30]

色谱峰：1—(−)α-蒎烯；2—(+)α-蒎烯
色谱柱：Cyclodex-B，30m×0.25mm，d_f=0.25μm
柱 温：75℃
载 气：H_2，46cm·s^{-1}
检测器：FID
气化室温度：250℃
检测器温度：300℃

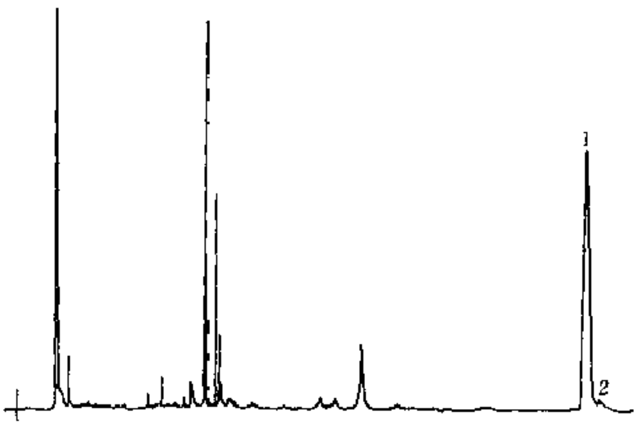


图 26-94 熏衣草油对映体[83]

色谱峰：1—(−)里哪醇；2—(+)里哪醇
色谱柱：CYDEX-B，50m×0.22mm，d_f=0.25μm
柱 温：90℃
检测器：FID

第五节　氨基酸色谱图

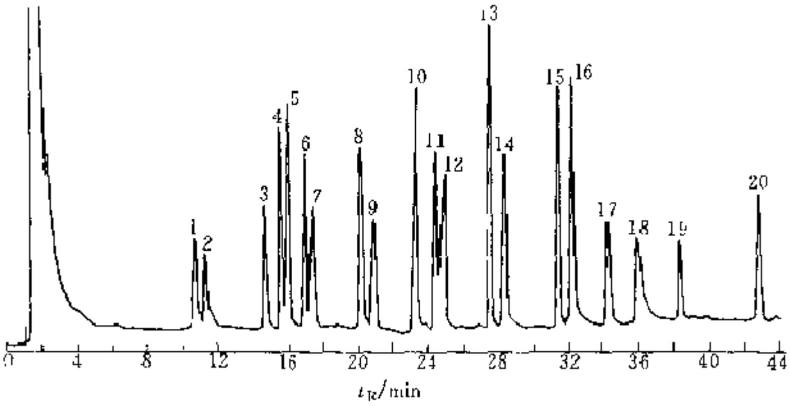


图 26-95　氨基酸(酯化衍生物)[46]

色谱峰：1—丙氨酸；2—甘氨酸；3—缬氨酸；4—苏氨酸；5—丝氨酸；6—亮氨酸；7—异亮氨酸；8—脯氨酸；9—半胱氨酸；10—羟基脯氨酸；11—蛋氨酸；12—天冬氨酸；13—苯丙氨酸；14—谷氨酸；15—赖氨酸；16—酪氨酸；17—精氨酸；18—组氨酸；19—色氨酸；20—胱氨酸

色谱柱：3% OV-1，Chromosorb W (80 目～100 目)；3.5m×6mm

柱　温：100℃(5min)→250℃，4℃·min⁻¹

载　气：He，40ml·min⁻¹

检测器：FID

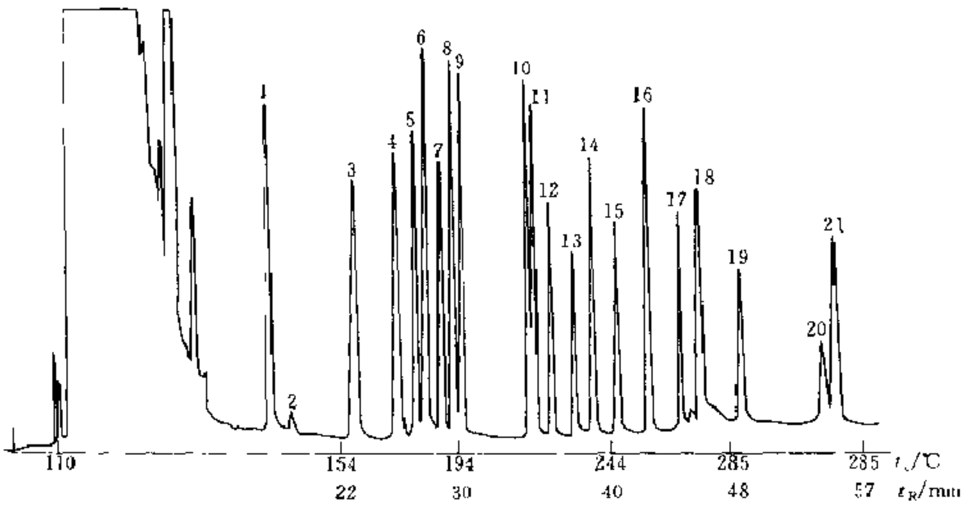


图 26-96　氨基酸(TMS 衍生物)(一)[47]

色谱峰：1—丙氨酸；2—α 甘氨酸；3—缬氨酸；4—亮氨酸；5—异亮氨酸；6—甘氨酸；7—脯氨酸；8—丝氨酸；9—苏氨酸；10—羟脯氨酸；11—天冬氨酸；12—蛋氨酸；13—谷氨酸；14—苯丙氨酸；15—精氨酸；16—赖氨酸；17—酪氨酸；18—组氨酸；19—菲（内标物）；20—色氨酸；21—胱氨酸

色谱柱：10% OV-11，Supelcoprt(100 目～120 目)，6m×2mm

柱　温：110℃→154℃，2℃·min⁻¹→285℃，5℃·min⁻¹

载　气：N_2，20ml·min

检测器：FID

气化室温度：275℃

检测器温度：300℃

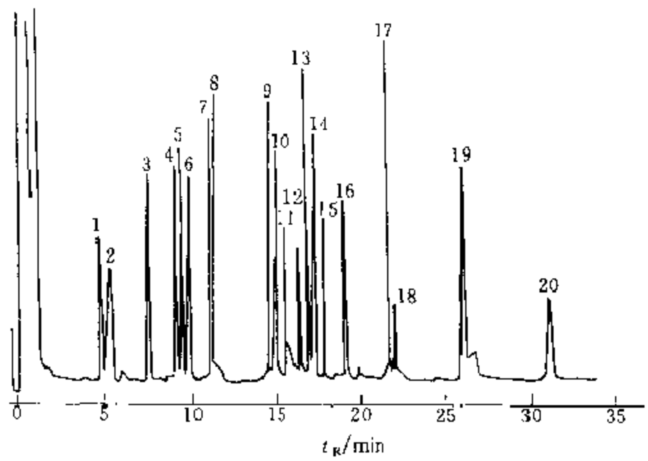


图 26-97 氨基酸(TMS 衍生物)(二)[86]

色谱峰：1—丙氨酸；2—甘氨酸；3—缬氨酸；4—亮氨酸；5—异亮氨酸；6—脯氨酸；7—丝氨酸；8—苏氨酸；9—羟脯氨酸；10—甲硫氨酸；11—半胱氨酸；12—精氨酸；13—苯丙氨酸；14—天冬氨酸；15—赖氨酸；16—谷氨酸；17—酪氨酸；18—组氨酸；19—色氨酸；20—胱氨酸

色谱柱：0.2% OV-7、GLC-100 玻璃珠(100 目～200 目)，2.67m×2mm

柱 温：90℃(4min)→225℃，4℃·min^{-1} 气化室温度：215℃

检测器：FID 检测器温度：250℃

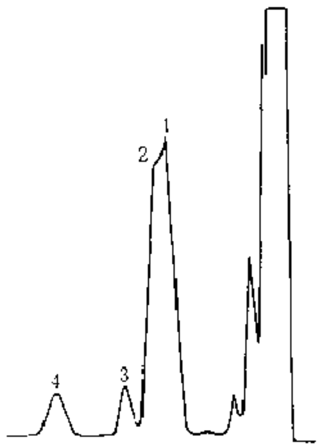


图 26-98 硒蛋氨酸与蛋氨酸(BSA 衍生物)[90]

色谱峰：1—蛋氨酸；2—天冬氨酸；3—硒蛋氨酸；4—谷氨酸

色谱柱：4% SE-30，Chromosorb G AW DMCS(60 目～80 目)，1m×2mm

柱 温：132℃

载 气：N_2，45ml·min^{-1}

检测器：FID

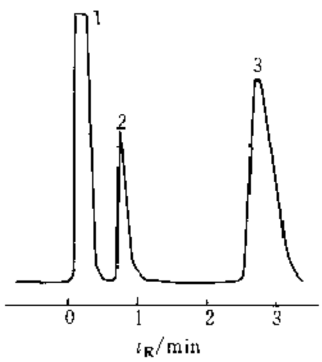


图 26-99 硒胱氨酸(溴化氰衍生物)[5]

色谱峰：1—二硫化碳；2—硒氰酸甲酯；3—磷酸三甲酯

色谱柱：10% EGS，Chromosorb W AW (60 目～80 目)，2m×3mm

柱 温：150℃

载 气：N_2

检测器：FID

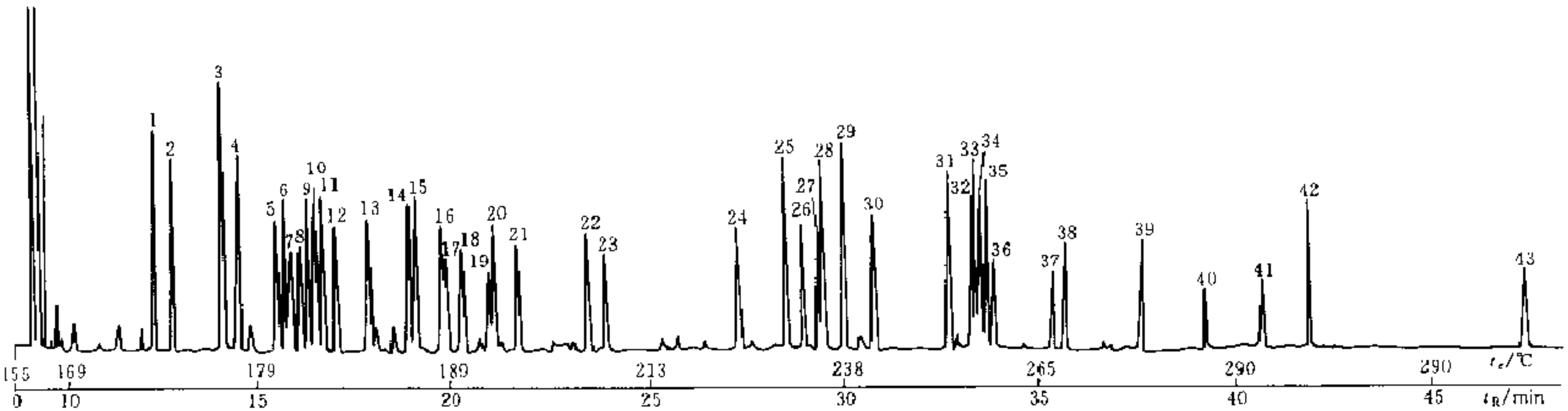


图 26-100 氨基酸(TBDMS 衍生物)[189]

色谱峰：1—丙氨酸；2—甘氨酸；3—肌氨酸+2-氨基异丁酸；4—缬氨醇+2-氨基丁酸；5—β-丙氨酸；6—N-甲基丙氨酸；7—β-氨基异丁酸；8—亮氨醇；9—缬氨酸；10—2-氨基-4-戊烯酸；11—正缬氨酸；12—异缬氨酸；13—亮氨酸；14—别异亮氨酸；15—异亮氨酸；16—正亮氨酸(内标)；17—γ-氨基丁酸；18—脯氨酸；19—N-甲基缬氨酸；20—α-甲基亮氨酸；21—N-甲基亮氨酸；22—哌可酸；23—N-甲基异亮氨酸；24—蛋氨酸；25—丝氨酸；26—α-甲基蛋氨酸；27—苯基丙氨醇；28—苏氨酸；29—别苏氨酸；30—苯基丙氨酸；31—天冬氨酸；32—羟脯氨酸；33—N-甲基苯基丙氨酸；34—β-甲基天冬氨酸；35—α-甲基天冬氨酸；36—半胱氨酸；37—谷氨酸；38—鸟氨酸；39—赖氨酸；10—精氨酸；41—组氨酸；42—酪氨酸；43—色氨酸

色谱柱：SPB-1，30m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱　温：153℃（2min）→190℃，2℃·min^{-1}→220℃，5℃·min^{-1}→290℃（20min），10℃·min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FID

气化室温度：260℃

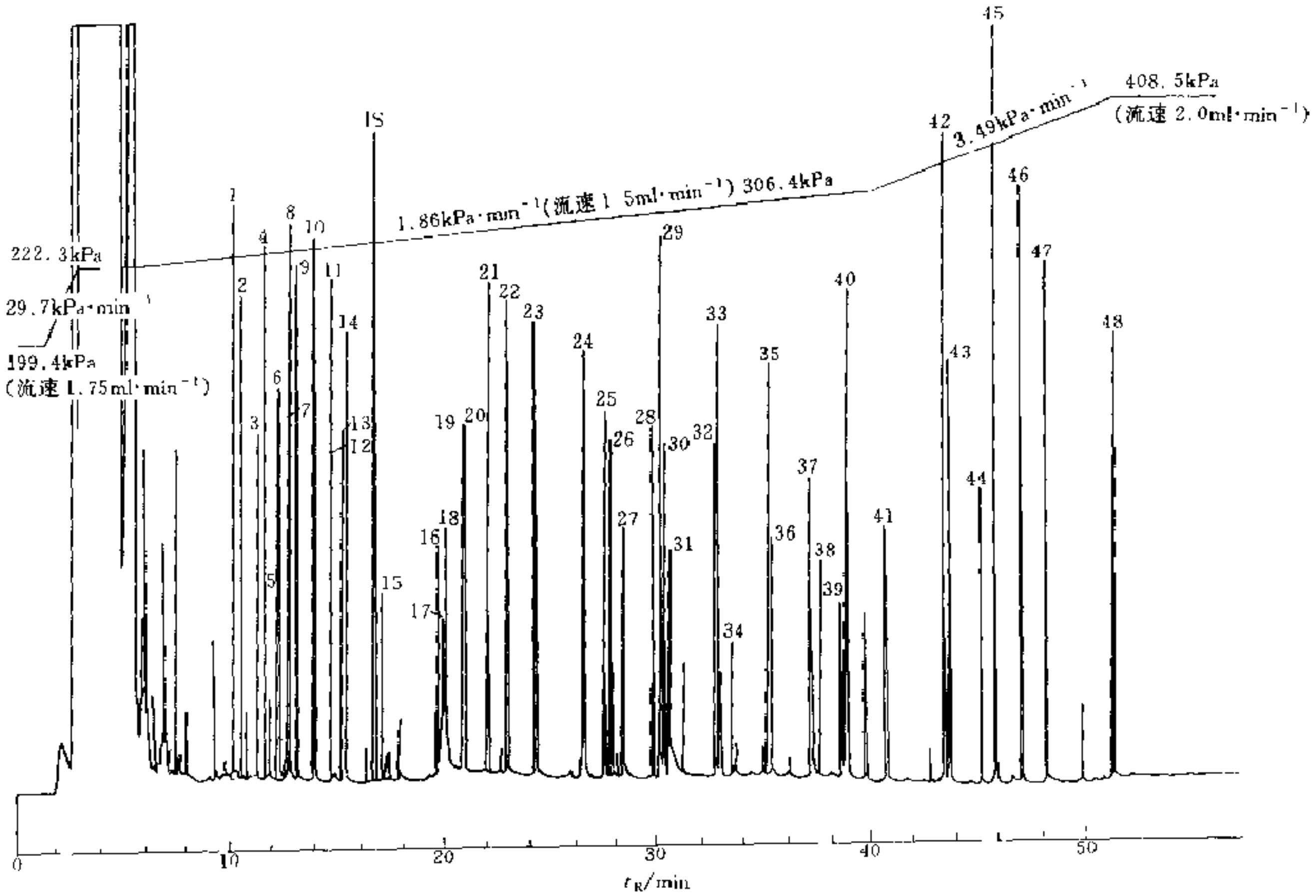


图 26-101 生物学的氨基酸(tBDMSi 衍生物)[92]

色谱峰：1—丙氨酸；2—甘氨酸；3—正磷-L-丝氨酸；4—L-α-氨基正丁酸；5—尿素；6—β-丙氨酸；7—DL-β-氨基异丁酸；8—缬氨酸；9—L-正缬氨酸；10—亮氨酸；11—异亮氨酸；12—正亮氨酸；13—γ-氨基正丁酸；14—脯氨酸；15—肌氨酸；16—正二磷乙醇胺；17—肌酸酐；18—吡咯谷氨酸；19—蛋氨酸；20—ε-氨基正己酸；21—丝氨酸；22—苏氨酸；23—苯丙氨酸；24—天冬氨酸；25—羟基脯氨酸；26—半胱氨酸；27—3-甲基-1-组氨酸；28—谷氨酸；29—1-精氨酸+鸟氨酸+1-瓜氨酸；30—天冬酰胺；31—1-甲基-1-组氨酸；32—L-α-氨基己二酸；33—赖氨酸；34—谷氨酰胺；35—D,L-α-氨基庚二酸—2-瓜氨酸；36—精氨酸；37—组氨酸；38—肌肽；39—2-谷氨酰胺+1-色氨酸；40—酪氨酸；41—δ-羟基赖氨酸；42—D,L-ε-氨基庚二酸；43—2-色氨酸；44—羊毛硫氨酸；45—3-(3,4-二羟基苯基)-D,L-丙氨酸；46—胱硫醚；47—半胱氨酸；48—高半胱氨酸

色谱柱：HP-1，50m×0.2mm，d_f=0.25μm

柱　温：40℃(1min)→145℃(3min)，70℃·min⁻¹→245℃，3℃·min⁻¹→305℃(6min)，5℃·min⁻¹

载　气：程序升载气，详见色谱图

检测器：FID

第六节　甾族化合物色谱图

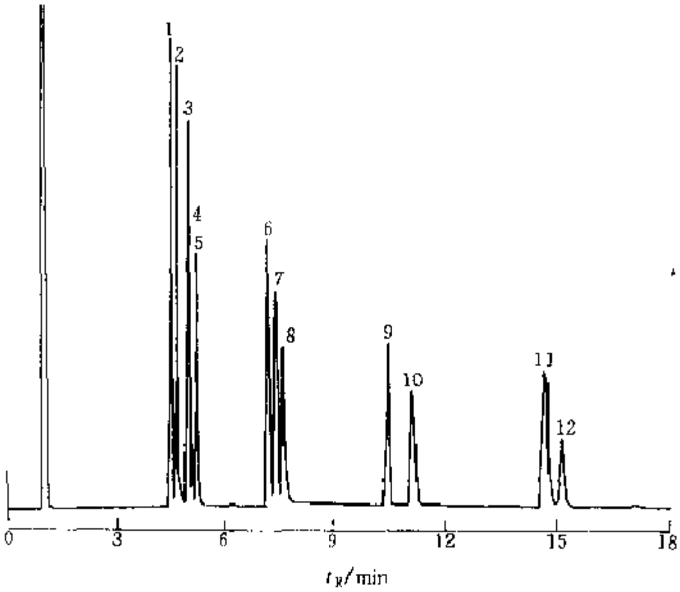


图 26-102　甾族化合物（一）[33]

色谱峰：1—粪甾烷；2—5-β 雄甾酮；3—5-α-胆甾烷；4—雄甾酮；5—表雄甾酮；6—17-α-雄二醇；7—β-雄二醇；8—雄酮；9—孕甾酮；10　胆甾醇；11—雄三醇；12—豆甾醇

色谱柱：DB-17，30m×0.25mm，d_f=0.15μm

柱　温：260℃

载　气：H_2，44cm·s^{-1}

检测器：FID

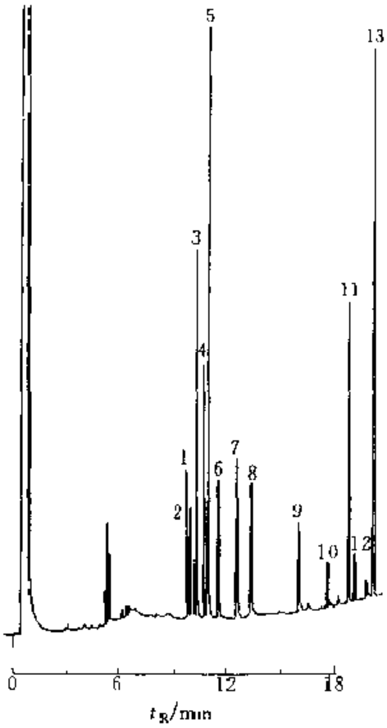


图 26-103　甾族化合物（二）[95]

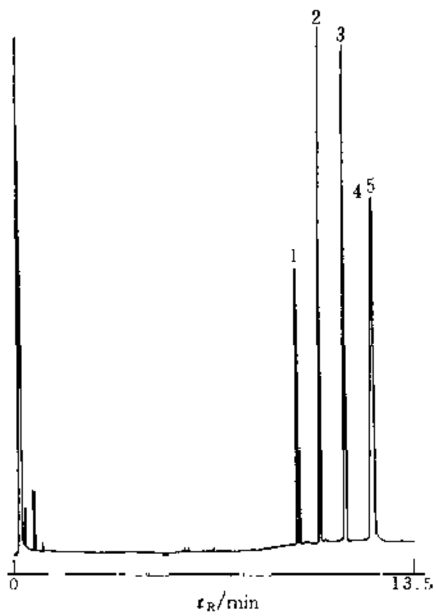
色谱峰：1—5 雄烯-3β 醇-17 酮；2—5-雄烯-3β,17β-二醇；3—5α(H)-雄烯-17β-醇-3-酮；4—4-雄烯-3,17 二醇；5—4-雄烯-17β-醇-3-酮；6—5-孕甾烯-3β 醇-20-酮；7—4-孕甾烯 3,20-二酮；8—5α(H) 胆甾烷；9—5-胆甾烯-3β-醇；10—5,22-胆甾二烯-24β-乙基-3β-醇；11—5-胆甾烯-正丁醚；12—5-胆甾烯-3β-醇-7-酮；13—正丁酸-5-胆甾烯-3β-醇酯

色谱柱：BPI，12m×0.22mm，d_f=0.1μm

柱　温：50℃(2min)→200℃，快速升温→300℃，5℃·min^{-1}

检测器：FID

进样方式：柱上进样



色谱峰：1—胆甾醇月桂酸酯；2—胆甾醇肉豆蔻酸酯；3—胆甾醇棕榈酸酯；4—胆甾醇硬脂酸酯；5—胆甾醇油酸酯

色谱柱：DB-5，15m×0.32mm，d_f=0.25μm

柱　温：80℃(0.5min)→300℃，30℃·min^{-1}→330℃，6℃·min^{-1}

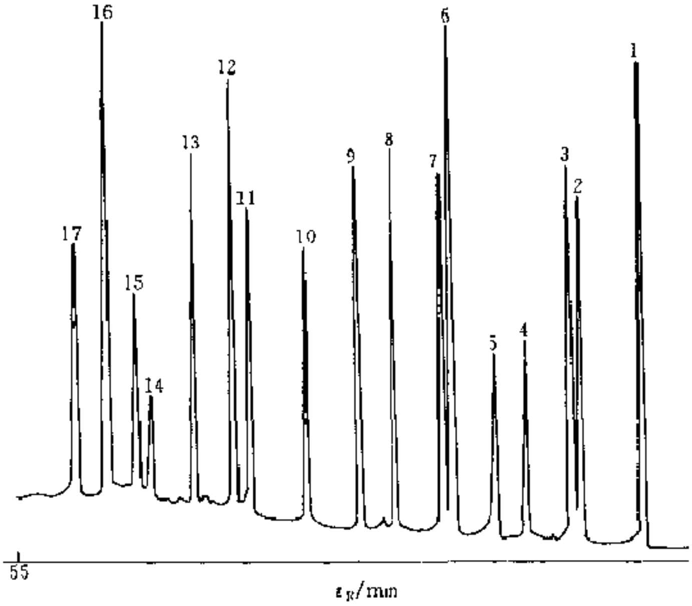
载　气：H_2，50cm·s^{-1}

检测器：FID

检测器温度：300℃

进样方式：冷柱头进样

图 26-104　胆甾醇酯[95]



色谱峰：1—C_{24}烷(标准物1)；2—雄甾酮；3—苯胆烷醇酮；4—脱氢表雄甾酮；5—11-氧代苯胆烷醇酮；6—11-羟基雄甾酮；7—11羟基苯胆烷醇酮；8—孕甾二醇；9—别孕甾二醇(内标物)；10—孕甾三醇；11—孕甾三醇酮；12—四羟基皮质甾酮；13—胆甾醇；14—20-皮甾酮四醇；15—20β-皮甾酮四醇；16—20β-皮甾五醇；17—C_{34}烷(标准物2)

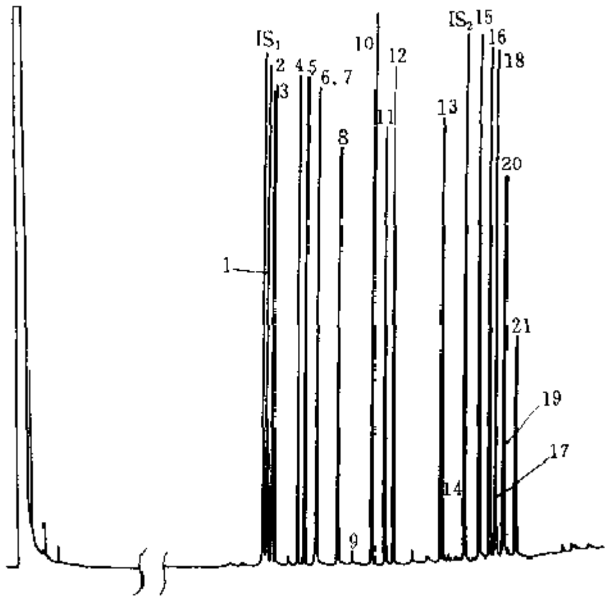
色谱柱：SP-2100 SCOT柱，30m

柱　温：190℃→300℃，2℃·min^{-1}

载　气：He

检测器：ECD

图 26-105　标准甾族化合物（TMS衍生物）[95]



色谱峰：1—3α,17α-二羟基-5β-雄甾烷；2—雄甾酮；3—5β-雄酮；4—脱氢表雄甾酮；5—3β,17β-二羟基-5-雄甾酮；6—11-酮雄酮；7—11β-羟基雄酮；8—11β-羟基雄酮；9—3α,16β,17α-三羟基-5β-雄甾烷；10—孕甾二醇；11—孕甾三醇；12—孕烯二醇；13—孕烯三醇；14—3β,17α,21-三羟基-5β-娠烷-20-酮；15—α-孕烷四醇酮；16—β-孕烷四醇酮；17—β-孕烷五醇；18—四氢代皮质酮；19—α-孕烷五醇；20—四氢代皮质醇；21—α-四氢代皮质醇；IS_1—5β-表雄酮；IS_2—3β,17α,21-三羟基-5β-孕烷-20-酮

色谱柱：Durabond 1，30m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱　温：120℃→280℃，2℃·min^{-1}

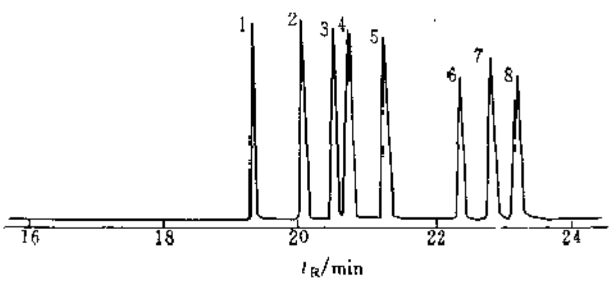
载　气：He，2ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：270℃

检测器温度：270℃

图 26-106　甾族化合物（TMS衍生物）[97]



色谱峰：1—胆固醇；2—19-羟基胆固醇；3—7β-羟基胆固醇；4—5α-6α-环氧化物；5—20α-羟基胆固醇；6—3β-5α-6β-三醇；7—7-氧代胆固醇；8—25-羟基胆固醇

色谱柱：HP-1，12m×0.2mm，d_f=0.33μm

柱　温：70℃(2min)→140℃→280℃，10℃·min^{-1}

载　气：He，83kPa

检测器：MS

气化室温度：265℃

图 26-107　胆固醇及其氧化物（TMS衍生物）[99]

色谱峰：1—别孕二醇；2—孕二醇；3—雌二醇；4—雌甾酮；5—苯胆烷醇酮；6 雌三醇；7 脱氢表雄酮；8- 孕烷醇酮；9 11 β 氧代苯胆烷醇酮；10—二十二烷

色谱柱：AN-600、Cab O-Sil PLOT 柱，18.5m×0.4mm

柱　温：220℃

载　气：N_2

检测器：FID

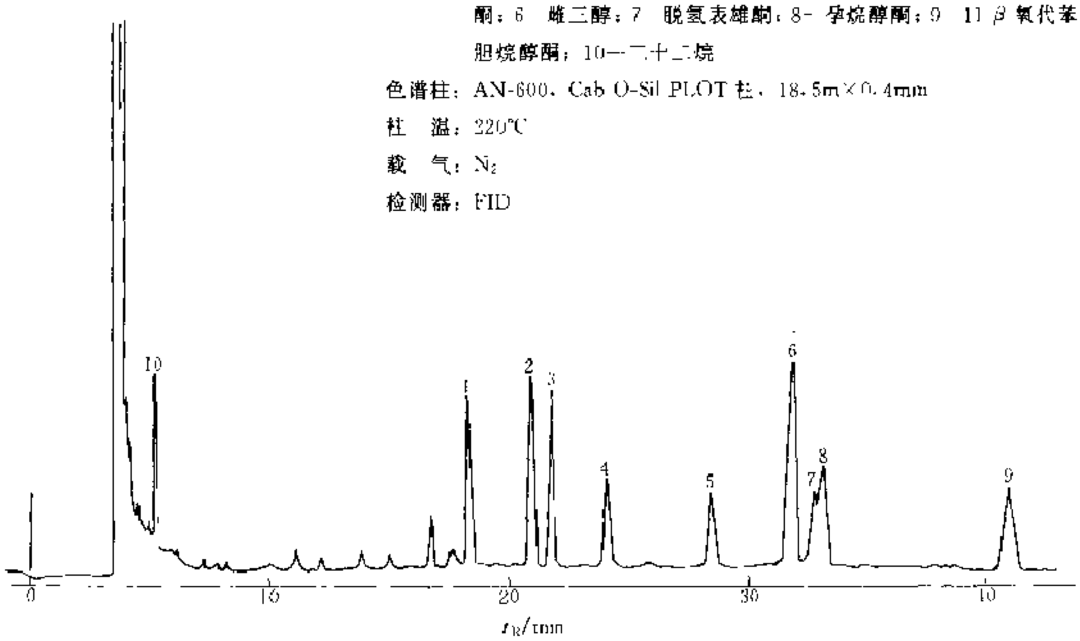


图 26-108　孕二醇（TMS 衍生物）[108]

色谱峰：

1—24 Nor-5α-胆石烯-22-3β-醇；2 顺 5,22-二烯胆甾 3β-醇；3—顺 5α-胆甾-22-烯-3β-醇；4—反-5α-胆甾-22 烯-3β 醇；5—5-胆甾烯-3β 醇；6—5α-胆甾烷-3β-醇；7 -5α 胆甾 24-烯 3β 醇+5,22 麦角二烯-3β-醇；8—5α-胆甾-7-烯-3β-醇+5α 麦角甾-22-烯-3β-醇；9—5,24(28) 麦角二烯-3β 醇；10—5α-麦角甾 24 (28) -烯-3β-醇；11 -5α 六氢麦角甾-3β-醇；12—5,22-豆甾二烯-3β-醇；13—5,α-(C_{29}甾醇)；14—5-豆固烯-3β-醇；15 5α-豆固烷-3β 醇+5,24(28)-豆甾二烯-3β-醇；16- 5α 豆固烯-24 (28) -3β-醇

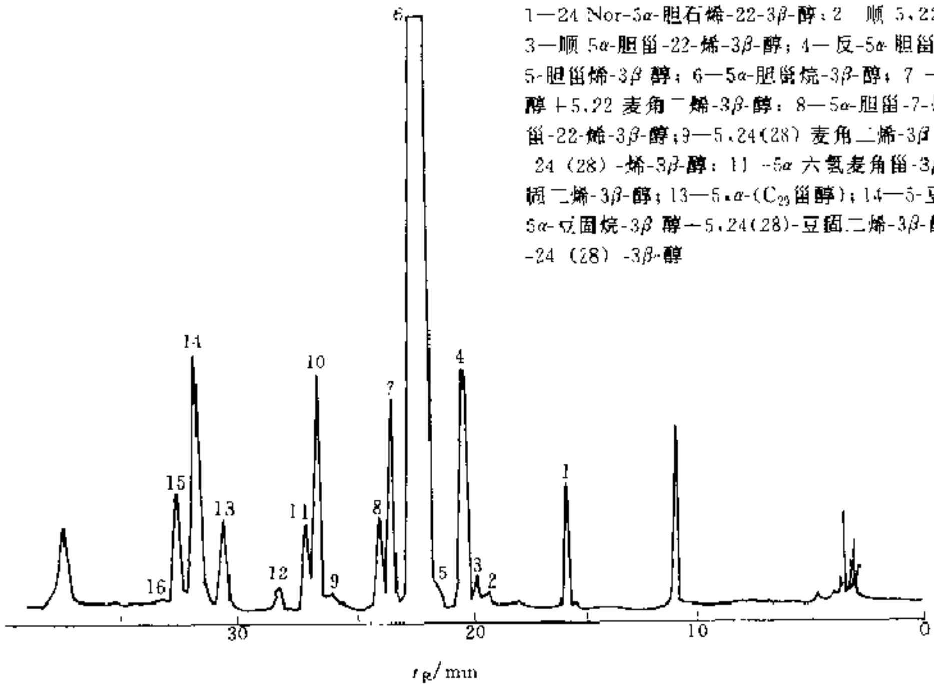


图 26-109　海绵甾醇(TMS 醚衍生物)[109]

色谱柱：OV 1，SCOT 柱，50m×0.5mm

柱　温：275℃

载　气：He，6ml·min^{-1}

检测器：MS

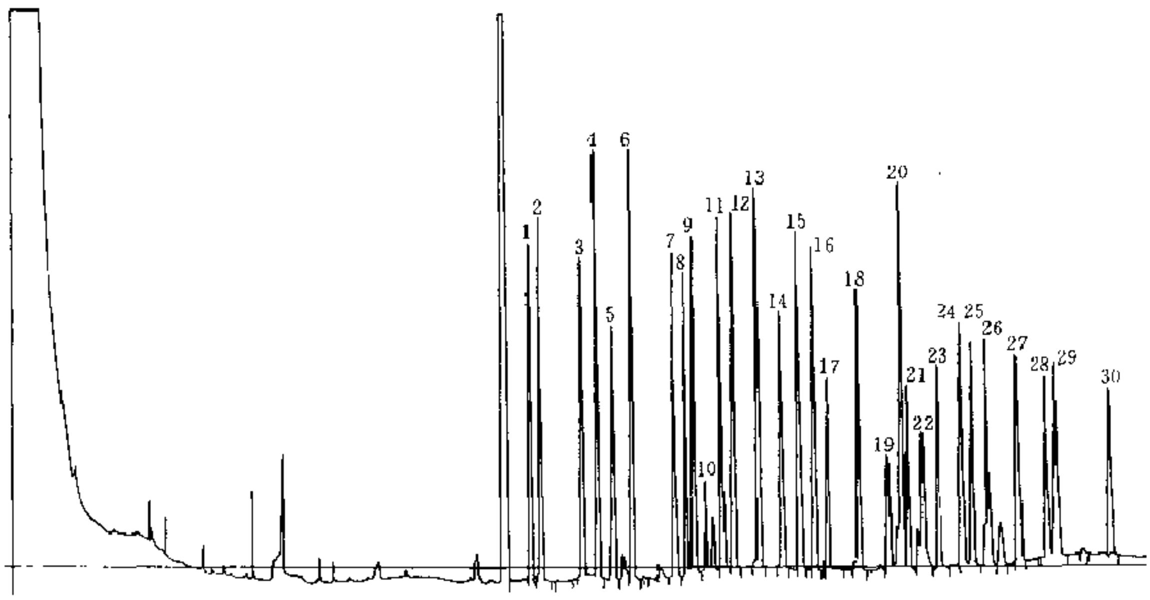


图 26-110　甾族化合物(MO-TMS 衍生物)(一)

色谱峰：1—雄甾酮；2—5β-雄酮；3—脱氢-表雄甾酮；4—Δ^5 雄烯-3β,17β-二酮；5—11 酮基-5β-雄酮；6—雌二醇；7—11-羟基-雄甾酮；8—11-羟基 5β-雄酮；9—表孕烷醇酮；10—16α-羟基脱氢表雄甾酮；11—别孕二醇；12—孕二醇；13—孕二醇；14—16-酮基雄烯二酮；15—Δ^5-雄烯 3β,16α,17β-三酮；16—四氢 S；17—四氢-DOC；18—17-酮基孕三醇；19—16α-羟基 孕烷醇酮；20—孕烷醇-3β、17α,20α-三酮；21—四氢可的松；22—四氢-A；23—四氢皮质酮；24—四氢皮质醇；25—别四氢皮质醇；26—α-孕烷四醇酮；27—β-孕烷四醇酮；28—胆固醇；29—α-八氢可的松；30—甲基脱氧胆烷(内标物)

色谱柱：CP-Sil5，25m×0.22mm

柱　温：100℃→210℃，25℃·min^{-1}→265℃，1.5℃·min^{-1}

载　气：He，$\bar{u}$=21.7cm·s^{-1}　　气化室温度：260℃

检测器：FID　　检测器温度：275℃

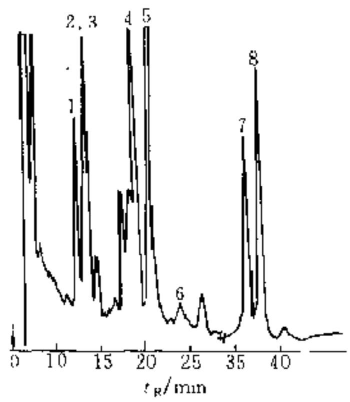


图 26-111　甾类化合物(MO-TMS 衍生物)(二)[103]

色谱峰：1—雄甾酮；2—脱氢表雄酮；3—异雄甾酮；4—孕甾二醇；5—孕烯醇酮；6—脱氧肾上腺皮质酮；7—肾上腺皮质酮；8—氢化可的松

色谱柱：2% OV-101，Chromosorb W HP(80 目～100 目)，2m×4mm

柱　温：190℃→250℃(20min)，2℃·min^{-1}

载　气：N_2，10ml·min^{-1}

气化室温度：250℃～300℃

检测器温度：300℃～340℃

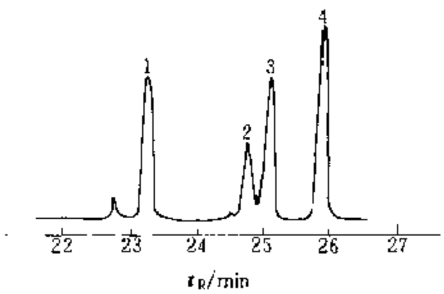


图 26-112　19-去甲雄烷醇酮(硅烷化衍生物)[...]

色谱峰：1—19-去甲雄酮；2—19-去甲表原胆烷醇酮；3—19-去甲原胆烷醇酮；4—19-去甲表雄酮

色谱柱：HP-5，17m×0.2mm，d_f=0.33μm

柱　温：180℃→240℃(10min)，2℃·min^{-1}

载　气：He

检测器：MS

气化室温度：280℃

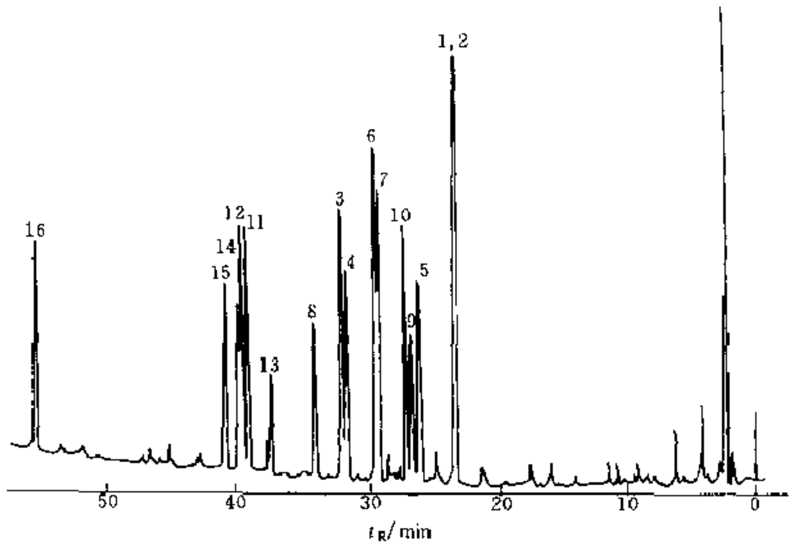


图 26-113　雄甾酮(MO-TMS 衍生物)[102]

色谱峰：1—雄甾酮；2—本胆烷醇酮；3—脱氢表雄甾酮；4—11-酮雄甾酮；5—11-酮本胆烷醇酮；6—11-羟基雄甾酮；7—11-羟基本胆烷醇酮；8—孕甾二醇；9—孕甾三醇；10—四氢脱氧皮质醇；11—四氢皮质酮；12—四氢皮质醇；13—别四氢皮质醇；14—皮甾酮四醇；15—β-皮甾酮四醇；16—胆甾醇丁酸酯(内标物)

色谱柱：聚二乙基硅氧烷空心柱

柱　温：200℃→290℃，2℃·min⁻¹

第七节　维生素与糖类色谱图

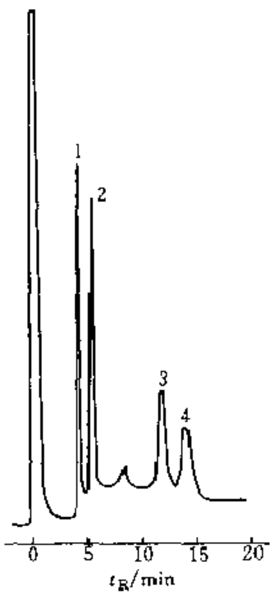


图 26-114　维生素 B_6(N-甲基-三氟乙酰胺衍生物)[104]

色谱峰：1—脱氧吡哆醇；2—吡哆醇；3—吡哆醛；4—吡哆胺

色谱柱：5% DC 550，Chromosorb P AW-DMCS (80 目～100 目)，1.82m×2mm

柱　温：150℃

载　气：Ar，40ml·min⁻¹

检测器：FID

气化室温度：220℃

检测器温度：250℃

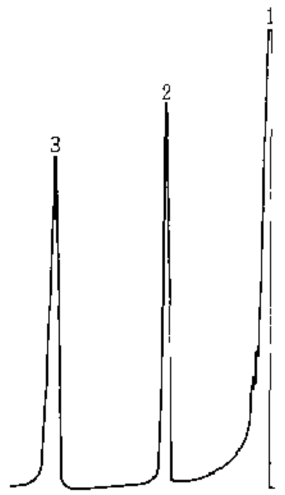


图 26-115　维生素 C(TMSA 衍生物)[105]

色谱峰：1—吡啶；2—十八烷；3—维生素 C

色谱柱：3% SE-30，Gas Chrom Q (100 目～120 目)，2m×2.3mm

柱　温：170℃

载　气：He，40ml·min⁻¹

检测器：FID

气化室温度：240℃

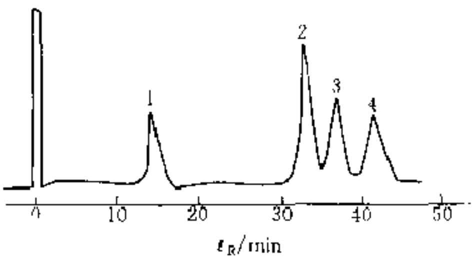


图 26-116　维生素 D_2(三甲基硅醚衍生物)[106]

色谱峰：1—5α 胆甾烷；2—胆甾醇；3—胆钙化醇；4—麦角化醇

色谱柱：30% OV-1，2.1m×6mm

柱　温：230℃

载　气：N_2，50ml·min^{-1}

检测器：FID

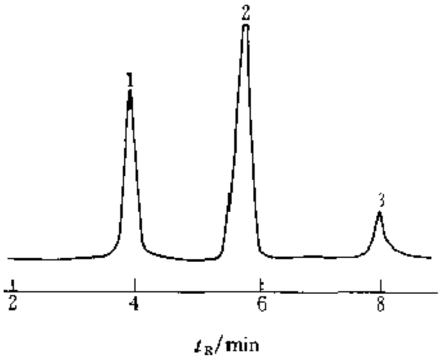


图 26-117　维生素 K_3[107]

色谱峰：1—维生素 K_3；2—维生素 K_2 氧化物；3—维生素 K_3 氧化物

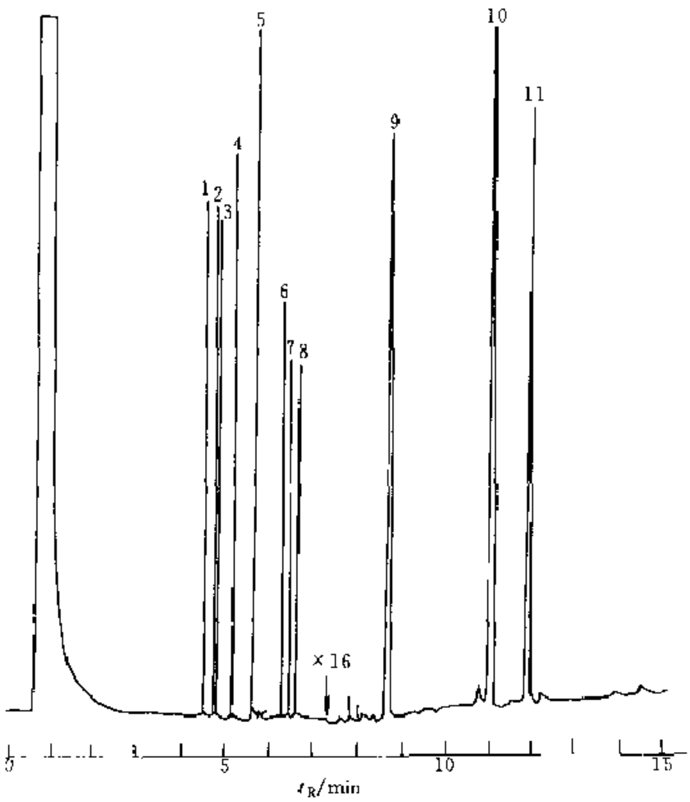
色谱柱：5% Silar 5CP，Gas Chrom. Q（80 目～100 目），1.82m×6mm

柱　温：180℃

载　气：He，50ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：220℃



色谱峰：1—脱氧核糖；2—鼠李糖；3—岩藻糖；4—核糖；5—木糖；6—甘露糖；7—半乳糖；8—葡萄糖；9—胞壁酸；10—葡萄胺；11—半乳糖胺

色谱柱：SP-2330，20m×0.25mm

柱　温：100℃(0.5min)→245℃，30℃·min^{-1}

载　气：He，2ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：245℃

检测器温度：295℃

图 26-118　中性及氨基酸糖类[108]

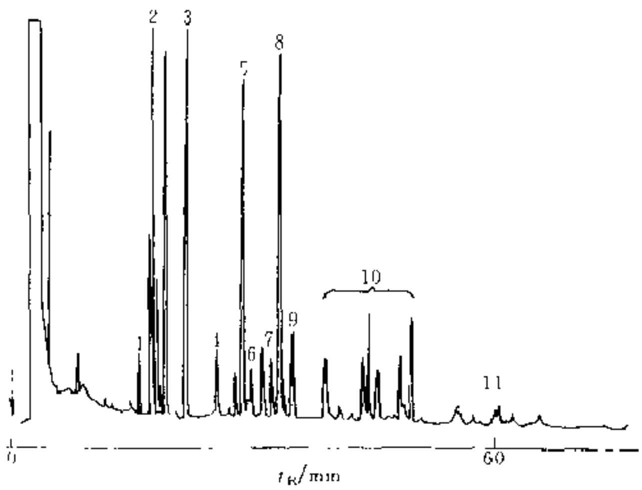


图 26-119　葡萄糖类

色谱峰：1—1,2-乙烯基葡萄糖；2—α-葡萄糖；3—β-葡萄糖；4—3α-羟基乙基葡萄糖；5—2α-羟基乙基葡萄糖；6—6α-羟基乙基葡萄糖；7—3β-羟基乙基葡萄糖；8—2β-羟基乙基葡萄糖；9—6β-羟基乙基葡萄糖；10—二取代基葡萄糖；11—三取代基葡萄糖

色谱柱：CP-Sil 5，25m×0.5mm

柱　温：200℃→250℃，1℃·min^{-1}

载　气：N_2，50kPa

检测器：FID

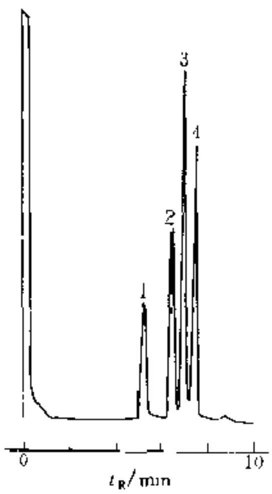


图 26-120　葡萄糖(TMS 衍生物)[illegible]

色谱峰：1—α-D-葡萄糖(Ⅰ)；2—β-D-葡萄糖(Ⅰ)；3—α-D-葡萄糖(Ⅱ)；4—β-D-葡萄糖(Ⅱ)

色谱柱：Heliflex AT-210，10m×0.53mm，d_f=1.2μm

柱　温：80℃(1min)→150℃，7℃·min^{-1}

载　气：He，12ml·min^{-1}

检测器：FID

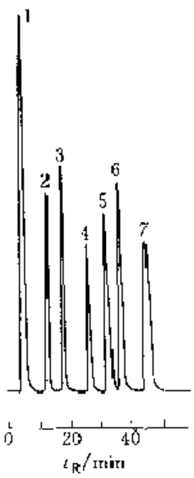


图 26-121　糖类(三甲基硅醚衍生物加水处理)[illegible]

色谱峰：1—溶剂；2—阿拉伯糖；3—木糖；4—甘露糖；5—半乳糖；6—葡萄糖；7—正二十烷(内标物)

色谱柱：10% SE-30，Chromosorb W AW-DMCS (80 目～100 目)，3m×3mm

柱　温：195℃

载　气：N_2，16ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：230℃

检测器温度：230℃

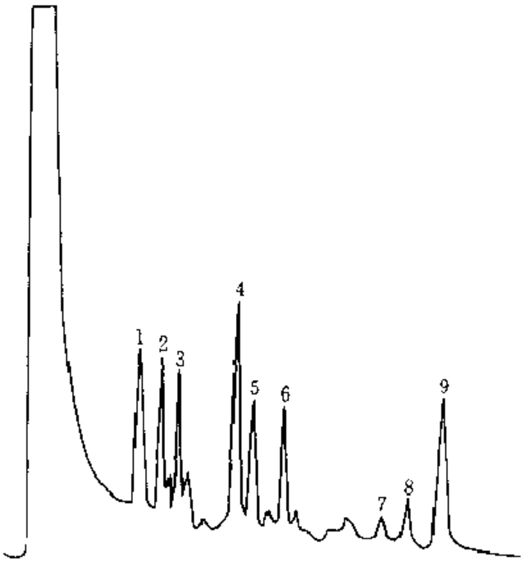


图 26-122　糖类(TMS 衍生物)(一)[illegible]

色谱峰：1—岩藻糖；2—阿拉伯糖；3—木糖；4—甘露糖醇；5—半乳糖；6—葡萄糖；7—*N*-乙酰半乳糖；8—*N*-乙酰葡萄糖；9—肌醇

色谱柱：OV-101，20m×0.22mm

柱　温：145℃(2min)→190℃，4℃·min^{-1}→220℃，1℃·min^{-1}

载　气：N_2，$\overline{u}$=9cm·s^{-1}　　气化室温度：210℃

检测器：FID　　检测器温度：170℃

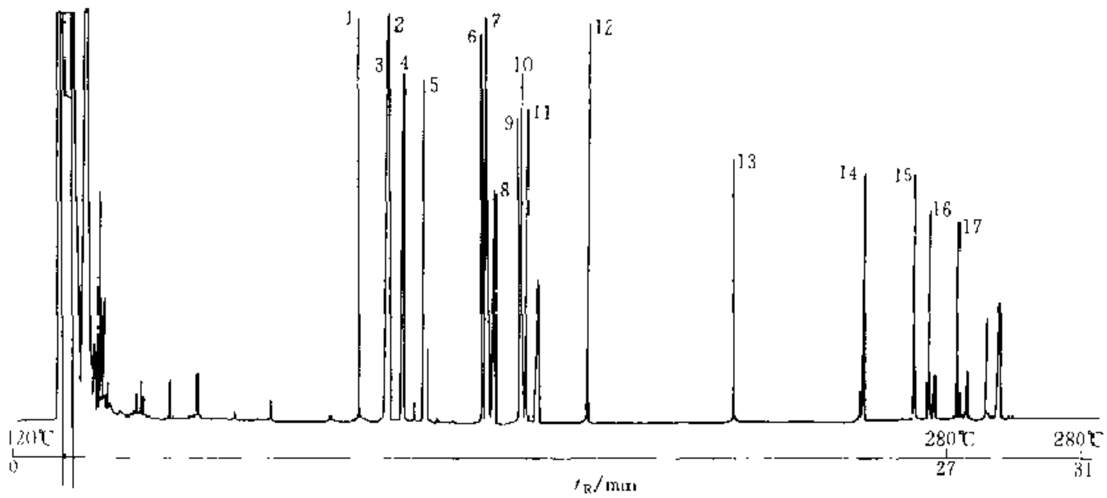


图 26-123　糖类(TMS 衍生物)(二)

色谱峰：1—核糖醇；2—木糖；3—阿拉伯糖；4—核糖；5—鼠李糖；6—甘露糖醇；7—山梨糖醇；8—果糖；9—半乳糖；10—甘露糖；11—葡萄糖；12—肌糖；13—苯基-β-D-吡喃背葡萄糖；14—蔗糖；15—海藻糖；16—乳糖；17—麦芽糖

色谱柱：SE-30，20m×0.32mm　　检测器：FID

柱　温：120℃→280℃，6℃·min⁻¹　　气化室温度：270℃

载　气：He，60kPa　　检测器温度：280℃

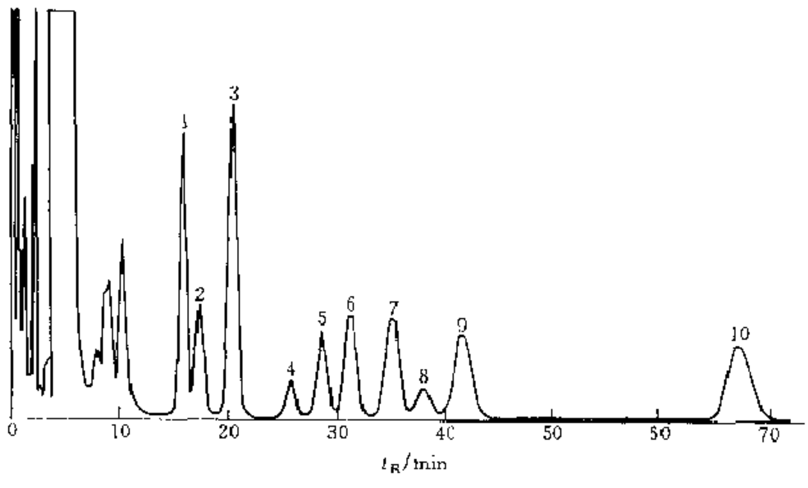


图 26-124　糖类(TMS 衍生物)(三)[129]

色谱峰：1—核糖；2—鼠李糖；3—α-甘露糖；4—γ-半乳糖；5—α-半乳糖；6—内标物；7—α-葡萄糖；8—β-甘露糖；9—β-半乳糖；10—β-葡萄糖

色谱柱：15% Carbowax 20M，Chromosorb W DMCS(80 目～100 目)，3.65m×6mm

柱　温：170℃

载　气：He，100ml·min⁻¹

检测器：FID

气化室温度：300℃

检测器温度：270℃

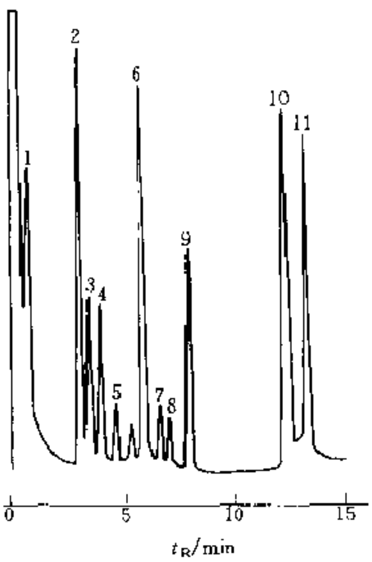


图 26-125 糖类(TMS 衍生物)(四)[71]

色谱峰：1—甘油；2—L(+)-鼠李糖(Ⅰ)；3—L(+)-鼠李糖(Ⅱ)；4—D(+)-木糖；5—D(−)-核糖；6—卫茅醇；7—D(−)-半乳糖；8—D(+)-甘露糖；9—内消旋肌醇；10—蔗糖；11—D(+)-海藻糖

色谱柱：Hebflex AT-210，10m×0.53mm，d_f=1.2μm

柱　温：80℃ (1min) →170℃，7℃·min⁻¹

载　气：He，12ml·min⁻¹

检测器：FID

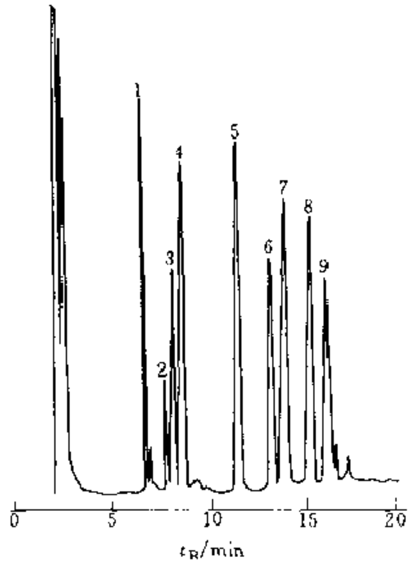


图 26-126 糖类(乙酰化衍生物)[84]

色谱峰：1—鼠李糖；2—岩藻糖；3—阿拉伯糖；4—木糖；5—α-甲基甘露糖；6—甘露糖；7—葡萄糖；8—半乳糖；9—肌醇

色谱柱：3-端烯丙基不对称二苯并-14-冠-4-二羟基冠醚-SE-54 (20∶80)，17m×0.25mm

柱　温：188℃ →230℃，2℃·min⁻¹

色谱峰：1—阿拉伯糖；2、3、6—核糖；4、5—鼠李糖；7、8—木糖；9、18—甘露糖；10～12—果糖；13、14—半乳糖；15—山梨糖；16、17、19、22—葡萄糖；20—甘露醇；21—甜醇；23—N-乙酰-D-半乳糖胺；24—肌醇

色谱柱：SE-33，28m×0.30mm

柱　温：150℃ →250℃，2℃·min⁻¹

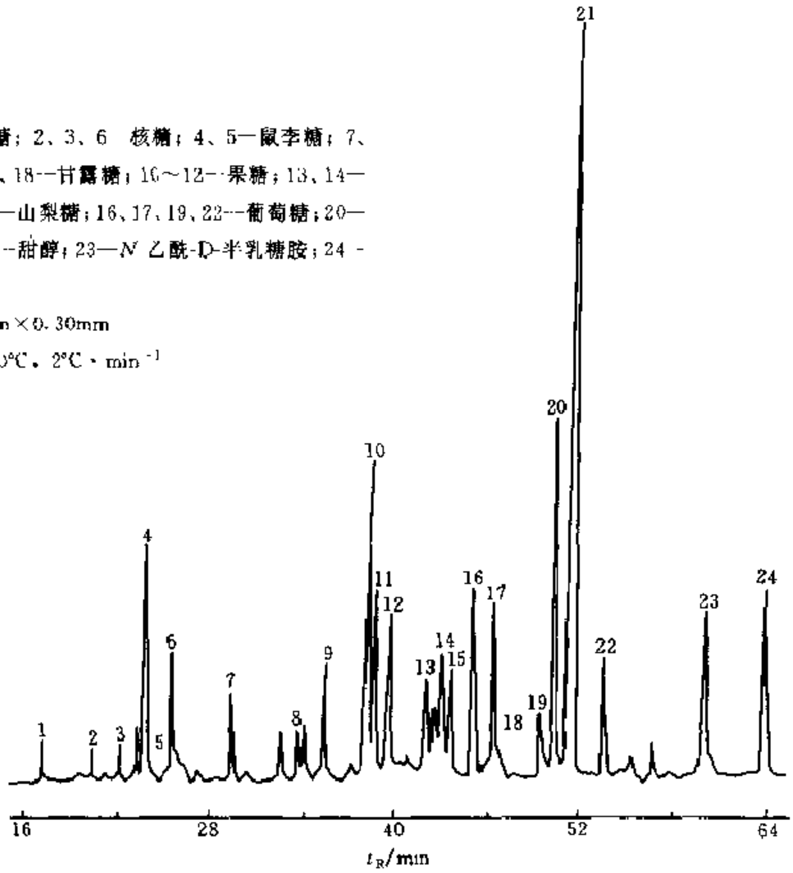


图 26-127 糖类(TMS-HDMS 衍生物)[85]

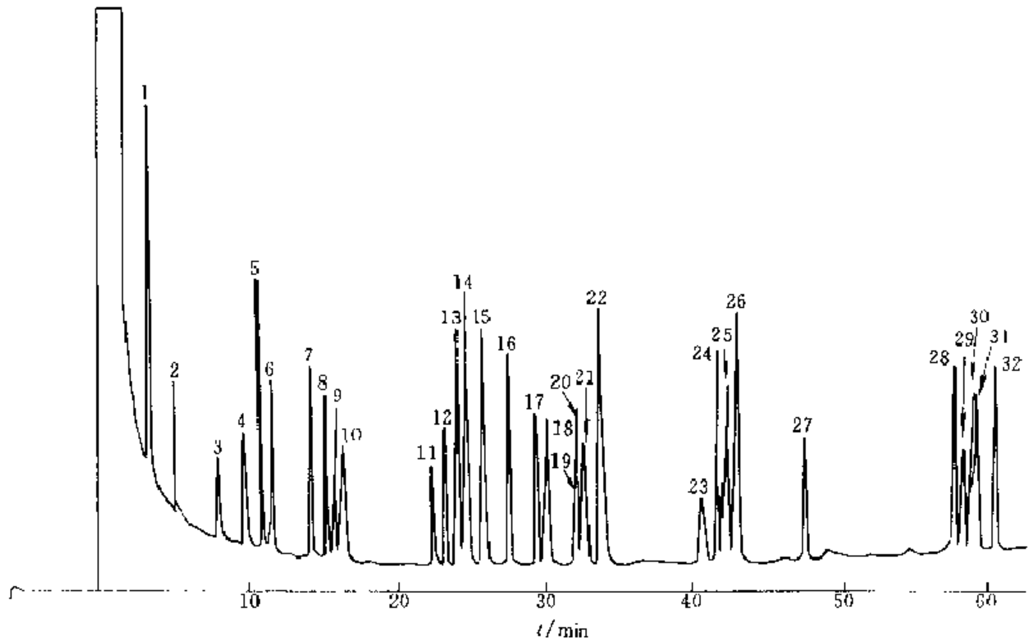


图 26-128　多糖与醛糖(聚乙酰衍生物)[58]

色谱峰：1—丙三醇；2—D-赤藓糖；3—L-苏氨糖；4—2-脱氧-D-核糖；5—赤藓糖醇；6—L-苏氨糖醇；7—D-核糖；8—D-阿拉伯糖；9—D-木糖；10—2-脱氧核醇；11—2-脱氧-D-葡萄糖；12—2-脱氧-D-半乳糖；13—核醇；14—D-阿拉伯醇；15—木醇；16—3-对甲基-D-葡萄糖；17—D-甘露糖；18—D-葡萄糖；19—D-半乳糖；20—2-脱氧葡萄糖；21—2-脱氧半乳糖；22—3-脱氧葡萄醇；23—肌醇；24—D-甘露醇；25—D-葡萄醇；26—半乳醇；27—D-甘油-葡萄糖-庚糖；28—D-甘油-D-葡萄糖-庚醇；29—D-甘油-D-甘露庚醇；30—L-甘油-D-葡萄糖庚醇；31—内消旋-甘油-葡萄糖-庚醇；32—D-甘油-D-半乳糖-庚醇

色谱柱：SE-30，64m×0.3mm　　柱　温：170℃→235℃，1℃·min^{-1}

参 考 文 献

1　范小振，丁天惠. 色谱，1994；12：8

2　Devyatykh G G，Zonn A D，Amelschenko A M，et al. Doklady Chemistry，1964；156：594

3　Kadeg R D，Christian G D. Anal Chim Acta，1977；88：117

4　Kaufman J J，Todd J E，Koski W S. Anal Chem，1957；29：1032

5　Seely G R，Oliver J P，Ritter D M，Anal Chem，1959；31：1993

6　Schomburg G，Koste R，Henneberg D. Z anal Chem，1959；170：258

7　Stuchlik J，Pacakova V. J Chromatogr，1979；174：224

8　Myers H W，Putnam R F. Anal Chem，1962；34：664

9　Bogaret R J，Rocheleau R E，Baron B N，J Chrom Sci，1986；24：109

10　Michael G，Danne U，Fischer G. J Chromatogr，1976；118：104

11　Friedrich K. Chem & Ind，1957：47

12　Fritz G，Ksinsik D. Z anorg u allgen Chem，1960；304：241

13　J Chrom Sci，1992；30：197

14　张翔，张荣泉，吕守本等. 色谱，1996；14：294

15　Bonelli E J，Hartmann H. Anal Chem，1963；35：1980

16　Soulages N L. J Gas Chrom，1968；6：356

17　Patterson P L. Chromatographia，1993；36：225

18　Talmi Y，Bostick D T. Anal Chem，1975；47：2145

19　左跃钢，庞叔薇. 分析化学，1985；13：890

20　Alli A，Jaffe R，Jones R. HRC，1994；17：745

21 Kitamura S, Sukamoto I I, Hayakawa K, et al. Med Biol (Tokyo), 1966; 72: 274
22 戴开平, 李焰, 施文赵, 色谱, 1992; 10: 218
23 连兰芬. 第八次全国色谱学术报告会文集, 1991: 219
24 丁勇, 董春燕, 孙国升等. 色谱, 1992; 10: 273
25 Longi P, Mazzochi R. Chim Ind (Milan), 1966, 48: 718
26 Pommier G, Guiochon G. J Chrom Sci, 1970; 8: 486
27 樊少英, 辛娟红, 王长宁. 分析化学, 1988; 16: 1095
28 Tavlaridis A, Neeb R. Z anal Chem, 1976; 282: 17
29 Sievers R E. 16th Annual Summer Symp ACS, Div Anal Chem. Tucson: Arizona, 1963 (June)
30 Schwarberg J E, Moshier R W. Talanta, 1964; 11: 1213
31 Sievers R E, Ponder B W, Morris M L, et al. Inorg Chem, 1963; 2: 693
32 Hill R D, Gesser H. J Gas Chrom, 1963; I (10): 11
33 Maslowska, Starzynski S. Chromatographia, 1983; 17: 418
34 徐福正, 金秀兰. 分析化学, 1985; 13: 258
35 Stephen W I, Thompson I J, Uden P C. Chem Commum, 1969: 269
36 Claeys M, Messen E, van Montagu M, et al. Fres Z anal Chem, 1978; 290: 125
37 SGE. Analytical Products 1993/1994 Catalogue, 1994: 44
38 Sucre L, Jennings W. HRC & CC, 1980; 3: 452
39 Blum W, Eglinton G. HRC, 1989; 12: 290
40 Quimby B D, Dryden P C, Sullivan J J. HRC, 1991; 14: 110
41 Eisentraut K J, Sievers R E. J A C S, 1965; 87: 5254
42 Marshall E M, Gallaher T N, Leary J J, et al. J Chrom Sci, 1988; 26: 352
43 J & W Scientific. 1994-1995 Chromatography Catalog & Reference Guide, 1995: 218
44 GB/T 13610—92
45 Chrompark News, 1985; 12 (1): 3
46 Chrompark News, 1986; 13 (2): 5
47 Pollock G E. J Chrom Sci, 1986; 24: 173
48 Aubeau R, Leroy J, Champeix L. J Chromatogr, 1965: 19: 219
49 Alltech Chromatography Catalog 350, 1995: 154
50 Henrich L H. J Chrom Sci, 1988; 26: 198
51 中国科学院化学研究所色谱组. 分析化学, 1979; 7: 83
52 GB 3393—82. 中国国家标准汇编, 1988; 28: 173
53 GB/T 13610—92
54 Chrompack. The Chrompack General Catalog, 1994: 66
55 Coleman P, Ettre L S. HRC & CC, 1985; 8: 2
56 Supelco. Catalog, 18: 17
57 上海石油化工总厂化工一厂. 分析化学, 1975; 3: 446
58 Pfaffenberger C D. In: Jennings, ed. Applications of Glass Capillary Gas Chromatography New York: Mercel Dekker 1981: 258
59 Conti M L, Lesimple M. J Chromatogr, 1967: 29: 32
60 Pushpa K K, Rao K A, Iyer R M. J Chrom Sci, 1990; 28: 441
61 Peter A, Kaplan, Smith D R. J Chem Sci, 1969; 7: 504
62 Bruner F, Cartoni G P, Liberti A. Anal Chem, 1966: 38: 298
63 Bruner F, Corcia A D. J Chromatogr, 1969; 45: 304
64 de Zeeuw J, de Nijs R C M, Henrich L T. J Chrom Sci, 1981; 25: 71
65 Kondo H, Takeuchi T, Haraguchi H. Chromatographia, 1992; 33: 169
66 Brunner F, Cartoni G P. J Chromatogr, 1963; 10: 396

67 Koenig W A, Frank N, Benecke J. J Chromatogr, 1982; 239: 227
68 J & W Scientific. 1994-1995 Chromatography Catalog & Reference Guide, 1995: 174
69 Kusters E, Portmann A. HRC, 1994; 17: 639
70 de Nijs R C M. Chrompack News, 1983; 10 (5): 6
71 Alltech. Chromatography Catalog 350, 1995: 25~47
72 楼献文, 刘有勤, 周良模. 第二届生物医药学色谱学术会议论文集, 1990: 379
73 Lou X, Liu Y, Zhou L. J Chromatogr, 1991; 552: 153
74 楼献文, 刘有勤, 王清海等. 色谱, 1992; 10: 195
75 段盛慧, 张晓明, 谢妮. 色谱, 1996; 14: 484
76 翟翠萍, 蔡端仁, 欧阳政. 色谱, 1993; 11: 347
77 Alltech. Chromatography Catalog 350, 1995: 76
78 夏仕文, 阮宗琴, 李树本. 色谱, 1996; 14: 454
79 曾苏. 色谱, 1994; 12: 359
80 J & W Scientific. 1994~1995 Chromatography Catalog & Reference Guide, 1995: 175~207
81 万宏, 董运宇, 欧庆瑜. 第八次全国色谱学术报告会文集, 1991: 13
82 Hardt I H, Wolf C, Gehrcke B, et al. HRC, 1994; 17: 859
83 SGE. Analytical Products 1993/1994 Catalogue, 1994: 41
84 曾昭睿, 范剑虹, 陈懿等. 色谱, 1994; 12: 227
85 吴采樱, 曾昭睿. 现代毛细管柱气相色谱法. 武汉: 武汉大学出版社, 1990: 311
86 Moss C W, Lambert M A, Diaz F J. J Chromatogr, 1971; 60: 134
87 Gehrke C W, Leimer K. J Chromatogr, 1971; 57: 219
88 Hardy J P, Kerrin S L. Anal Chem, 1972; 44: 1497
89 Simek P, Heydova A, Jegorov A. HRC, 1994; 17: 145
90 欧阳政, 熊冠兰, 李毅坚等. 色谱, 1985; 2: 205
91 农晋琦, 蔡端仁, 欧阳政. 色谱, 1994; 12: 28
92 Woo K L, Lee D S. J Chromatogr B, 1995; 665: 15
93 Alltech. Chromatography Catalog 350, 1995: 65
94 SGE. Analytical Products 1993/1994 Catalogue, 1994: 60
95 J & W Scientific. 1994-1995 Chromatography Catalog & Reference Guide, 1995: 117
96 Thomas B S. HRC & CC, 1980; 5: 241
97 Ludwig Koehn H, Henning H V. HRC & CC, 1986; 9: 35
98 Gramers C A, Vermeer E A, Franken J J. Chromatographia, 1977; 10: 417
99 Pizzofeirato L, Nicoli s, Lintas C. Chromatographia, 1993; 35: 269
100 Edmonds C G, Smith A G, Brooks C J W. J Chromatogr, 1977; 133: 372
101 叶磊, 张长久, 张亦中. 分析化学, 1995; 23: 32
102 Madani C, Chambaz E M, Breton J C, Chromatographia, 1977; 10: 466
103 胡振元, 蒋秀瑛, 邢圣民等. 分析化学, 1981; 9: 38
104 Patzer E M, Hilker D M, J Chromatogr, 1977; 135: 489
105 Vecchi M, Kaiser K. J Chromatogr, 1976; 26: 22
106 Bell J G, Christie A A. Analyst, 1974; 99: 385
107 Mee J M L, Brooks C C, Yanagihara K H. J Chromatogr, 1978; 110: 178
108 Hudson J R, Morgan S L, Fox A. HRC & CC, 1982; 5: 285
109 Sawardeker J S, Sloneker J H, Anal Chem, 1965; 37: 945
110 李铁林, 吴昌贤, 蒋挺大等. 分析化学, 1981; 9: 295
111 蒋秀瑛, 陈明灿, 顾新等. 全国第二届毛细管色谱报告会文集, 1984: 515

（李浩春　李全洪）

第二十七章　临床医学物质色谱图

第一节　尿液的色谱图

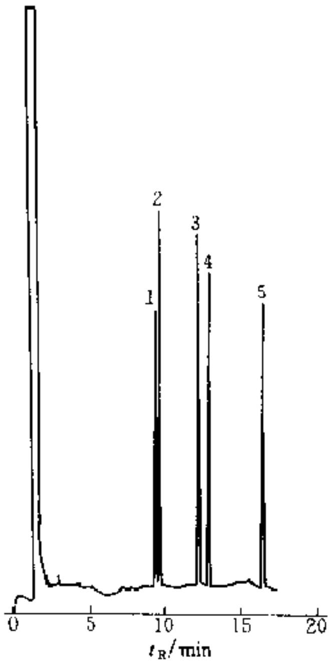


图 27-1　人尿中甲苯与二甲苯代谢产物（异丙基酯衍生物）[1]

色谱峰：1　马尿酸；2—邻甲基马尿酸；3—间甲基马尿酸；4—间甲基马尿酸；5—对乙基马尿酸（内标物）

色谱柱：OV-225，25m×0.2mm

柱　温：220℃

载　气：H_2，70kPa

检测器：FID

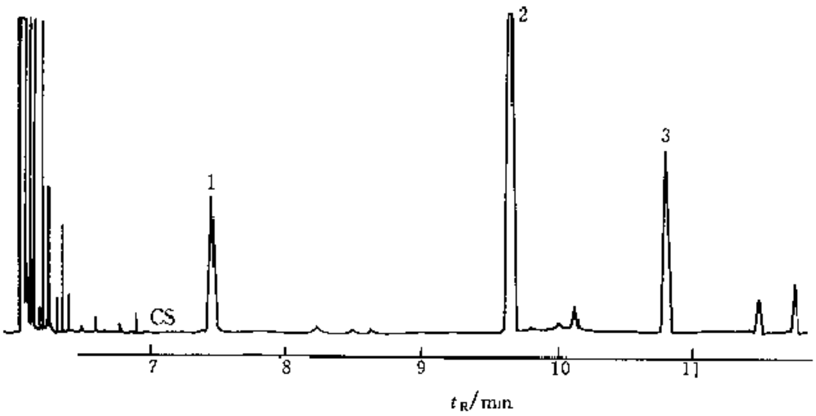


图 27-2　尿中酚（乙酸酯类衍生物）[2]

色谱峰：1—苯酚；2—对甲酚；3—3-氯酚（内标物）

色谱柱：5% 苯基甲基硅氧烷，25m×0.31mm，$d_f=0.52\mu m$

柱　温：从 60℃ 开始，以 8℃·min^{-1}速度程序升温　　载　气：H_2，40kPa

检测器：FID　　气化室温度：250℃

检测器温度：300℃

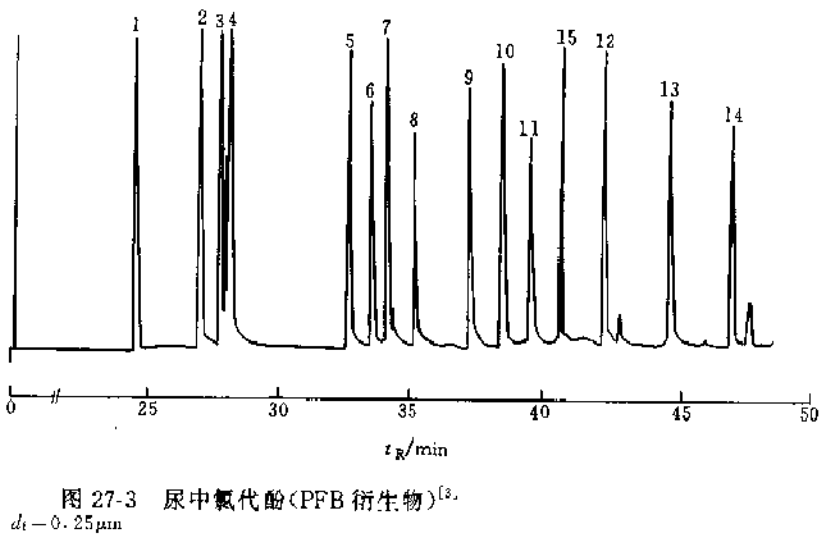


图 27-3　尿中氯代酚（PFB 衍生物）[3]

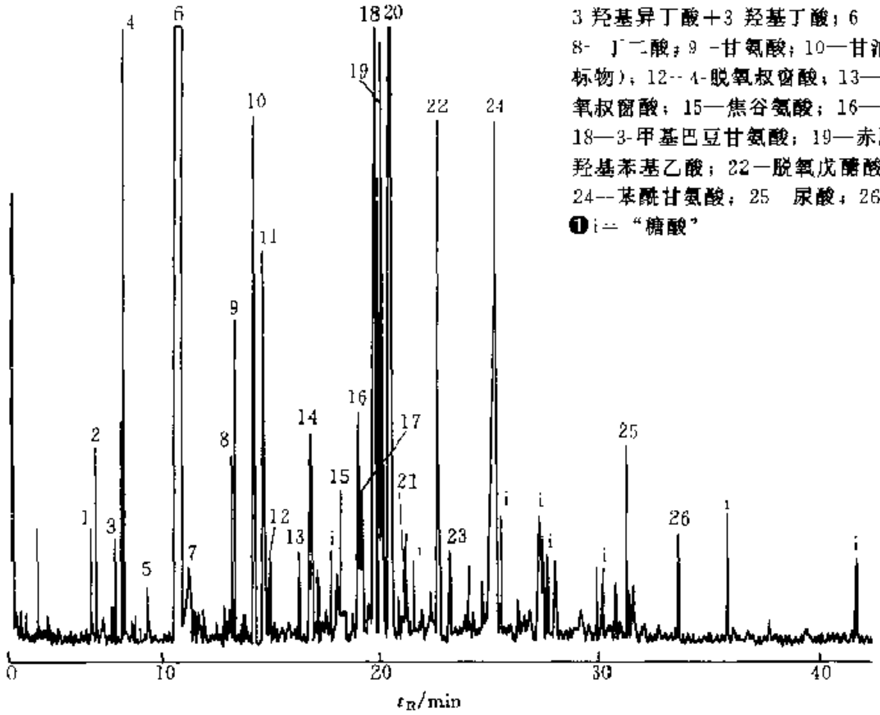
色谱峰：1—苯酚；2—邻甲酚；3—间甲酚；4—对甲酚；5—2-氯-5 甲基酚；6—4-氯-3-甲基酚；7　4-氯-2-甲基酚；8—2，4 二氯酚；9　2，4，6-三氯酚；10—2，3，6-三氯酚；11—2，4，5-三氯酚；12—2，3，5，6-四氯酚；13·2，3，4，5-四氯酚；14—五氯酚；15—2，6 二溴酚（内标物）

色谱柱：SPB-5，30m×0.25mm，d_f—0.25μm

柱　温：70℃（0.5min）→105℃（10min），30℃·min^{-1}→240℃（3min），4℃·min^{-1}

载　气：N_2，70kPa　　检测器：ECD

气化室温度：250℃　　检测器温度：300℃



色谱峰❶：

1—乳酸；2—乙醇酸；3—N-甲基甘氨酸；4—杂质；5—3-羟基异丁酸+3-羟基丁酸；6—3-羟基异戊酸；7—尿素；8—丁二酸；9—甘氨酸；10—甘油酸；11—2-苯基丁酸（内标物）；12—4-脱氧叔窗酸；13—3-脱氧叔窗酸；14—2-脱氧叔窗酸；15—焦谷氨酸；16—5-羟基甲基-2-糠酸；17、18—3-甲基巴豆甘氨酸；19—赤酮酸；20—苏酸；21—4-羟基苯基乙酸；22—脱氧戊醣酸；23—3-羟基苯基丙酸；24—苯酰甘氨酸；25—尿酸；26—硬脂酸

❶ i—"糖酸"

图 27-4　尿中有机酸[1]

色谱柱：Ultra-1，12m×0.2mm，d_f=0.33μm　　检测器：MS
柱　温：60℃→260℃（2min），5℃·min^{-1}　　气化室温度：260℃
载　气：He，$\bar{u}$=27cm·s^{-1}

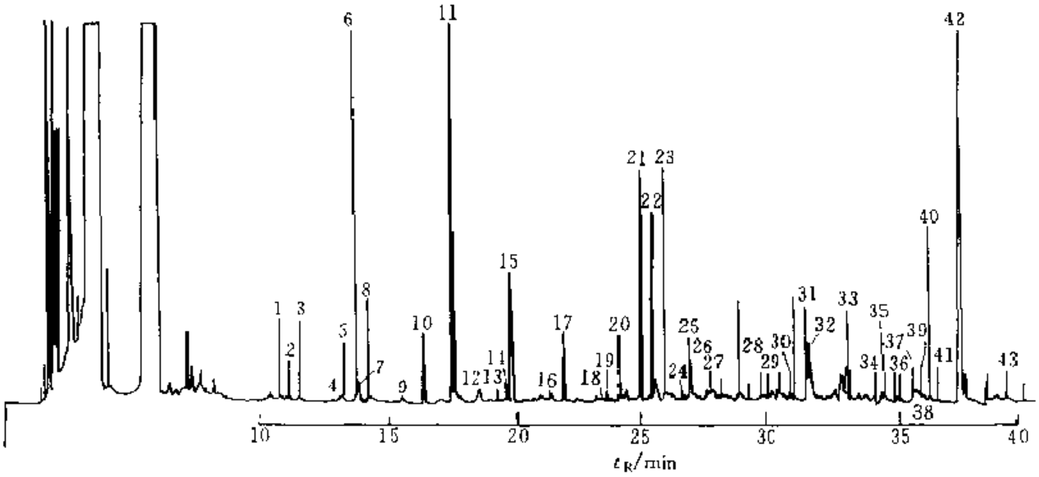


图 27-5　尿中有机酸（TMS 衍生物）[1]

色谱峰：1—酚；2—乳酸；3—乙醇酸；4—二羟基乙酸；5—草酸；6—对甲苯酚；7—丙酮酸；8—硫酸；9—3-羟基异戊酸；10—苯甲酸；11—磷酸；12—丁二酸；13—甘油酸；14—4-脱氧季酮（赤型）酸；15—4-脱氧季酮（苏型）酸；16—3-脱氧季酮酸；17—2-脱氧季酮酸；18—哌可酸；19—己二酸；20—焦谷氨酸；21—赤酮酸；22—苏氨酸；23—托品酸（内标物）；24—4-羟基苯甲酸；25—2-氧代戊二酸；26—4-羟基苯乙酸；27—2-脱氧核糖核酸；28—乌头酸；29—4-羟基-3-甲氧基苯甲酸；30—阿拉伯酸；31—马尿酸；32—柠檬酸；33—葡糖酸-1,5-内酯；34—4-吡哆酸；35—吲哚-3-乙酸；36—葡糖酸；37—半乳糖酸；38—十六烷酸；39—葡糖醛酸；40—葡糖二酸；41—半乳糖二酸；42—尿酸；43—4-羟基马尿酸

色谱柱：苯基（5%）甲基硅氧烷，25m×0.31mm　　柱　温：50℃→300℃，5℃·min^{-1}
载　气：He，$\bar{u}$=25cm·s^{-1}　　检测器：FID
气化室温度：250℃　　检测器温度：300℃

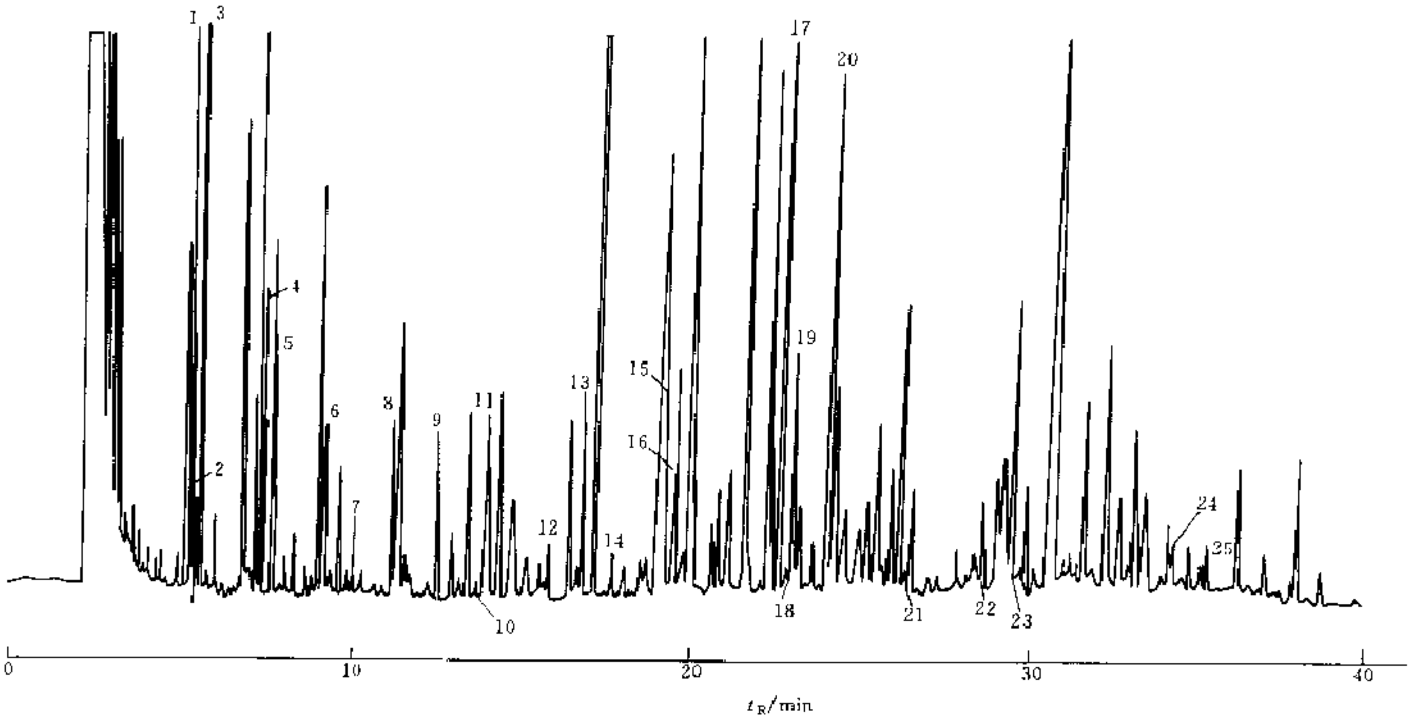


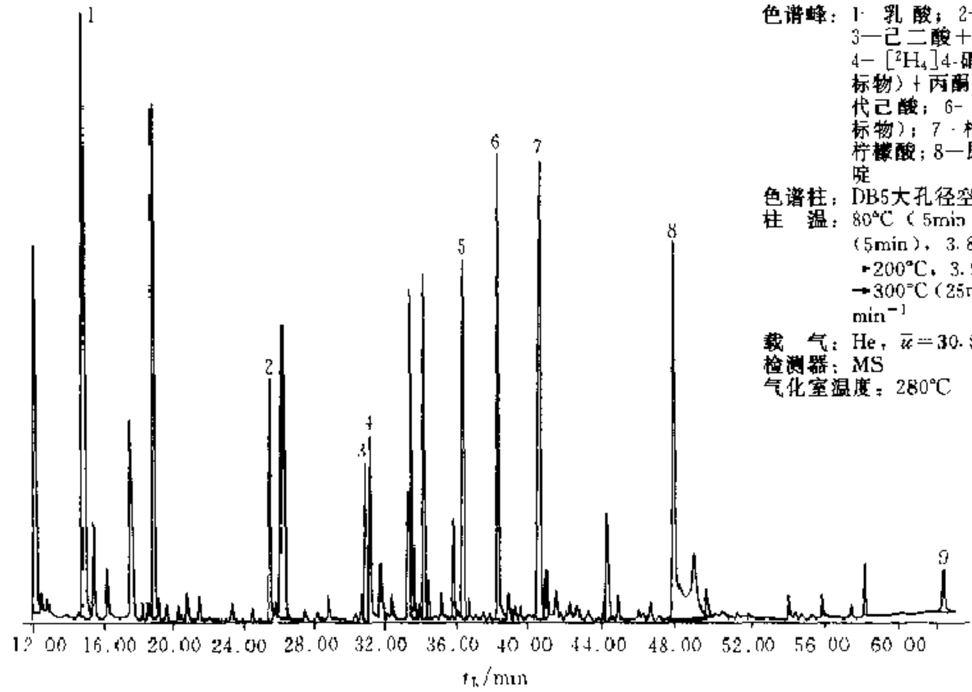
图 27-6　尿中有机酸(硅烷化衍生物)[4]

色谱峰：1—正戊酸；2—正己酸；3—羟苯乙酸；4—二羟醋酸；5—正庚酸；6—丙二酸；7—苯甲酸；8—苯乙酸；9—丁二酸；10—反丁烯二酸；11—壬酸；12—戊二酸；13—3-甲基戊二酸；14—癸酸；15—苹果酸；16—己二酸—对羟基苯甲酸；17—托品酸(内标)；18—庚二酸；19—3-羟基-3-甲基戊二酸；20—对羟基苯乙酸；21—辛二酸；22—反式乌头酸；23—2,5-二羟基苯乙酸；24—抗坏血酸；25—β-吲哚乙酸

色谱柱：SE-54，36m×0.32mm，d_f 0.25μm　　柱　温：70℃(3min)→190℃(3min)，2.5℃·min^{-1}

载　气：H_2，u=44cm·s^{-1}　　检测器：FID

气化室温度：250℃　　检测器温度：250℃



色谱峰：1- 乳 酸；2—尿 嘧 啶；3—己二酸＋人工制品；4—［$^2H_4$］4-硝基苯酚(内标物)＋丙酮酸；5—2-氧代己酸；6- 乳清酸(内标物)；7- 柠檬酸＋异柠檬酸；8—尿酸；9—尿啶

色谱柱：DB5大孔径空心柱

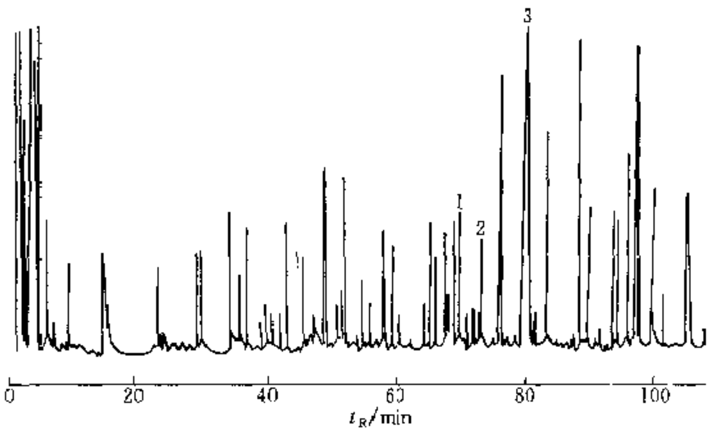
柱　温：80℃（5min）→180℃（5min），3.8℃·min^{-1}→200℃，3.9℃·min^{-1}→300℃(25min)，4℃·min^{-1}

载　气：He，$\overline{u}$＝30.50cm·s^{-1}

检测器：MS

气化室温度：280℃

图 27-7　少年人尿中有机酸(TMS 衍生物)[6]



色谱峰：1—4 羟基扁桃酸；2—4 羟苯基乳酸；3—马尿酸

色谱柱：OV-1701，25m×0.25mm

柱　温：40℃(10min)→230℃

图 27-8　肝硬化病人尿中有机酸(甲酯衍生物)[8]

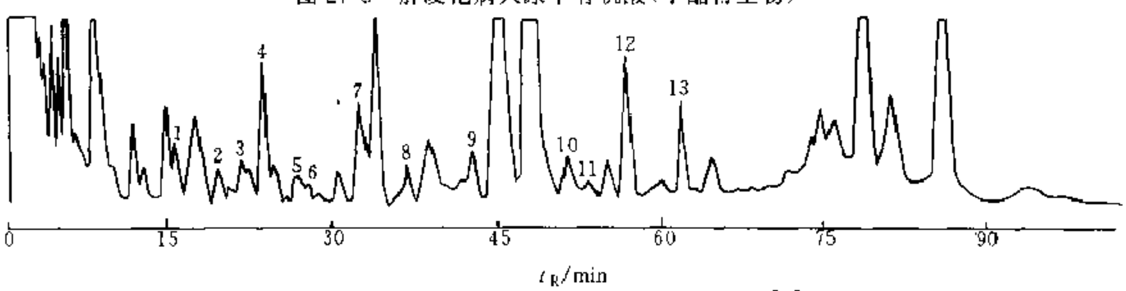


图 27-9　尿中有机芳香族酸(甲酯衍生物)[10]

色谱峰：1—邻羟基苯酸；2—邻羟基苯基乙酸；3—间羟基苯基乙酸；4—对羟基苯基乙酸；5—吲哚乙酸；6—苯基丙酮酸；7—马尿酸；8—3,4-二羟基-苯基乙酸；9—芳草扁桃酸；10—咖啡酸；11—吲哚乳酸；12—5-羟基吲哚基乙酸；13—十九烷酸(内标物)

色谱柱：10% F-60，1.83m×4mm

柱　温：100℃→280℃，2℃·min^{-1}

载　气：H_2

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：300℃

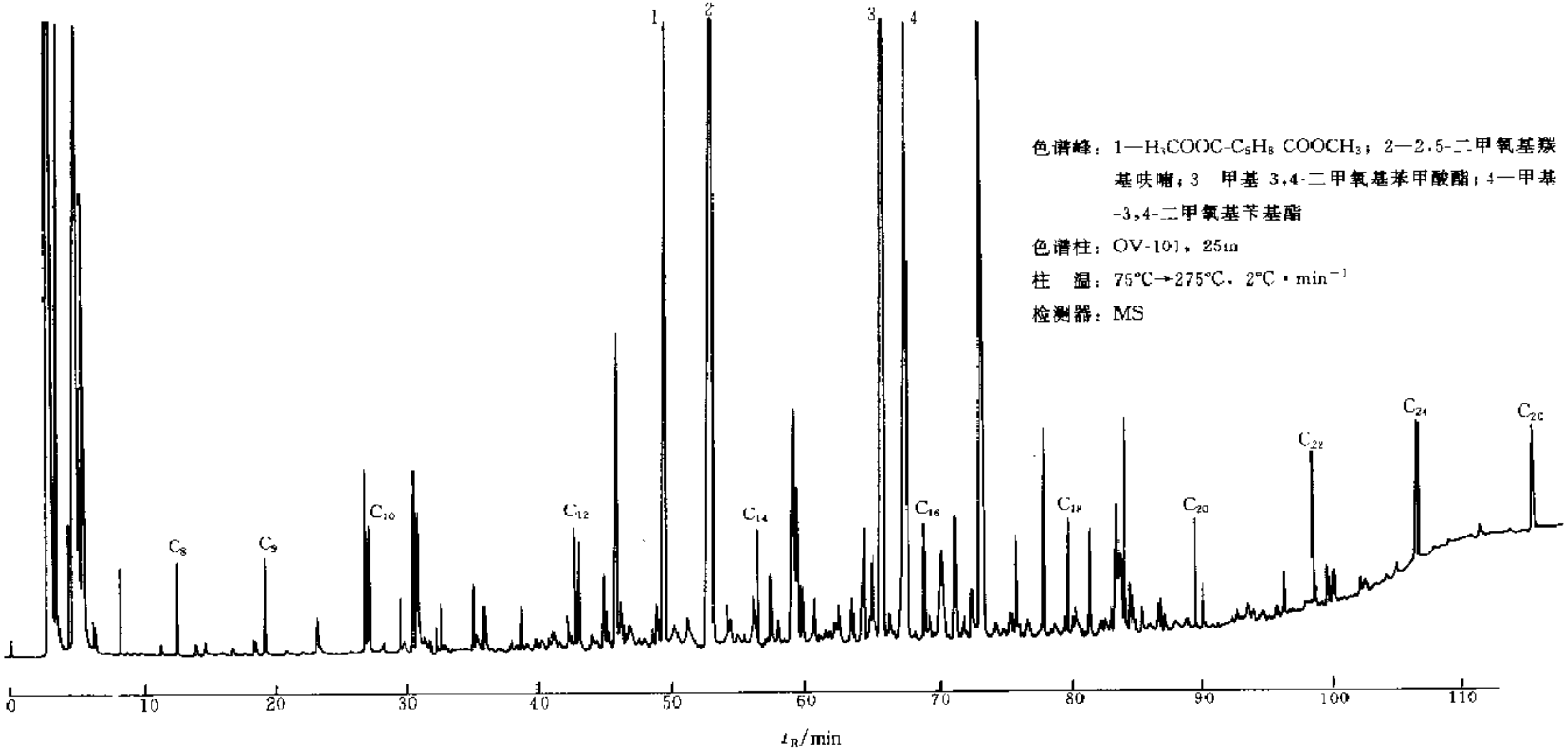


图 27-10 尿中有机酸(甲酯衍生物)[9]

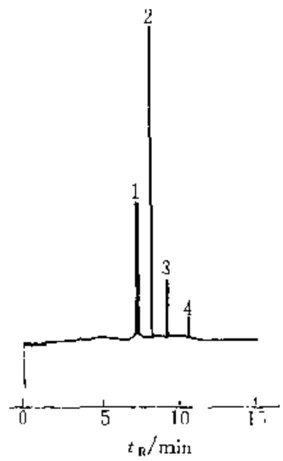


图 27-11 鼠尿中四戊锡及代谢物[29]

色谱峰：1—四戊锡；2—三戊基苯基锡；3—二戊基二苯基锡；4—戊基三苯基锡

色谱柱：Ultra-1，12m×0.2mm，d_f=0.33μm

柱　温：60℃(2min)→160℃，40℃·min^{-1}→260℃，20℃·min^{-1}

载　气：He，$\bar{u}$=36cm·s^{-1}

检测器：FPD

气化室温度：260℃

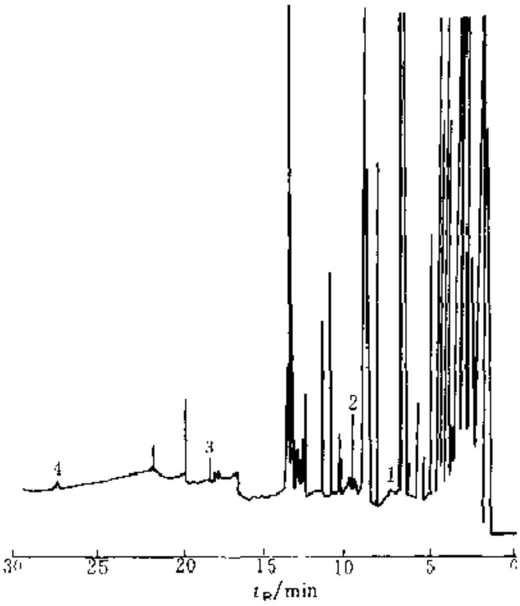


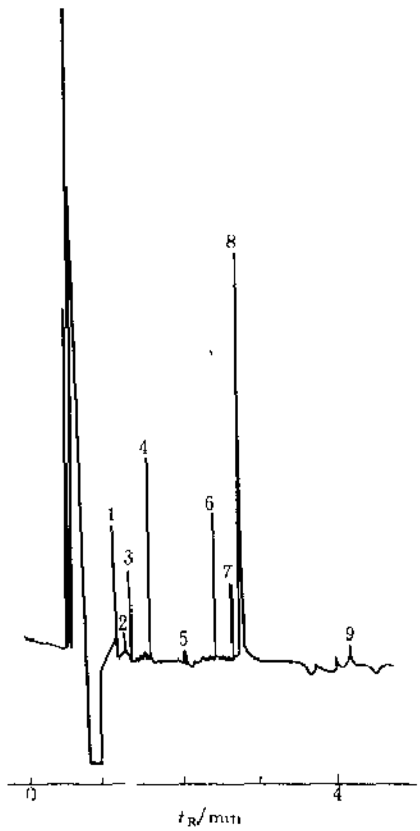
图 27-12 淋巴瘤患者尿中多胺（甲基七氟丁酰衍生物）[12]

色谱峰：1—1,3 丙二胺；2—腐胺；3—精脒；4—精胺

色谱柱：SE-54，50m×0.29mm

柱　温：120℃→260℃(10min)，7℃·min^{-1}

检测器：NPD



色谱峰：1—$CHCl_3$；2—CH_3CCl_3；3—CCl_4；4—$CHBrCl_2$；5—$CBrCl_3$；6—$CHBr_2Cl$；7—$Cl_2C=CCl_2$；8—内标物；9—$CHBr_3$

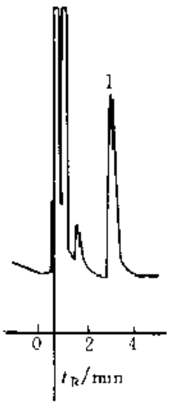
色谱柱：SE-52，20m×0.3mm

柱　温：50℃

载　气：H_2，$\bar{u}$=40cm·s^{-1}

检测器：ECD

图 27-13 尿中卤代烷烃[13]



色谱峰：1—碘丁酮
色谱柱：5% 硅油 I，405 担体(80 目～100 目)，2m×2.5mm
柱　温：110℃
载　气：N_2，40ml·min^{-1}
检测器：ECD
气化室温度：200℃
检测器温度：200℃

图 27-14　尿中碘(丁酮衍生物)[14]

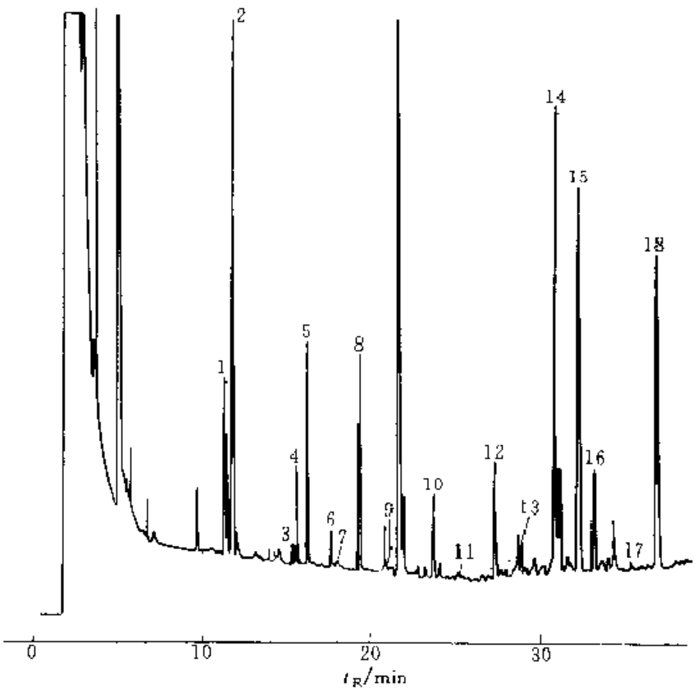


图 27-15　尿中氨基酸 (HBB 衍生物)[15]

色谱峰：1—丙氨酸；2—甘氨酸；3—缬氨酸；4—苏氨酸；5—丝氨酸；6—亮氨酸；7—异亮氨酸；8—降亮氨酸(内标物)；9—脯氨酸；10—羟基脯氨酸；11—蛋氨酸；12　天冬氨酸；13—苯基丙氨酸；14—谷氨酸；15—赖氨酸；16—酪氨酸；17—精氨酸；18—组氨酸

色谱柱：PS-225，25m×0.32mm，d_f=0.7μm

柱　温：110℃(5min)→265℃(20min)，4℃·min^{-1}

载　气：H_2，$\bar{u}$=36cm·s^{-1}

检测器：FID

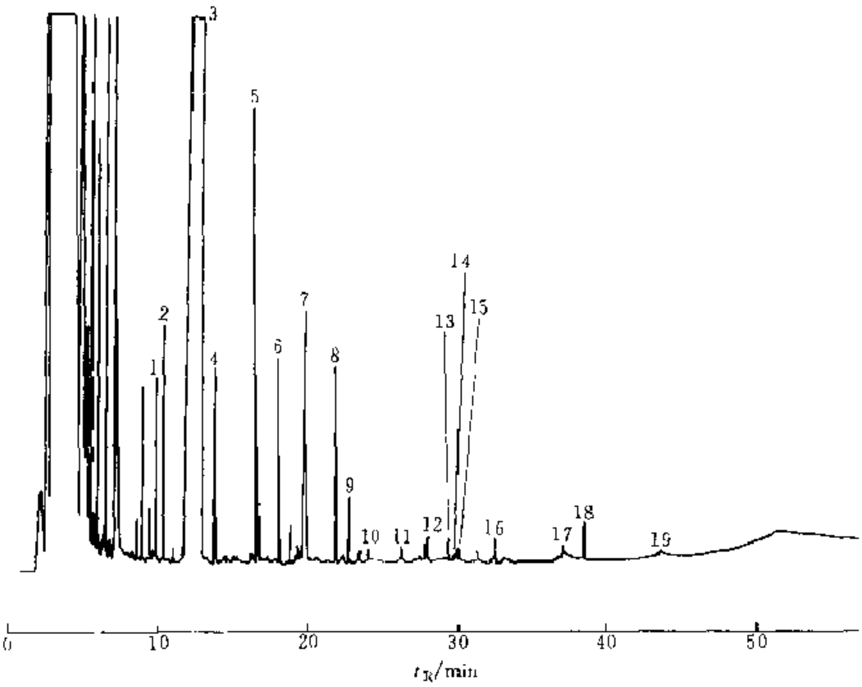


图 27-16 人尿中氨基酸(tBDMSi 衍生物)[16]

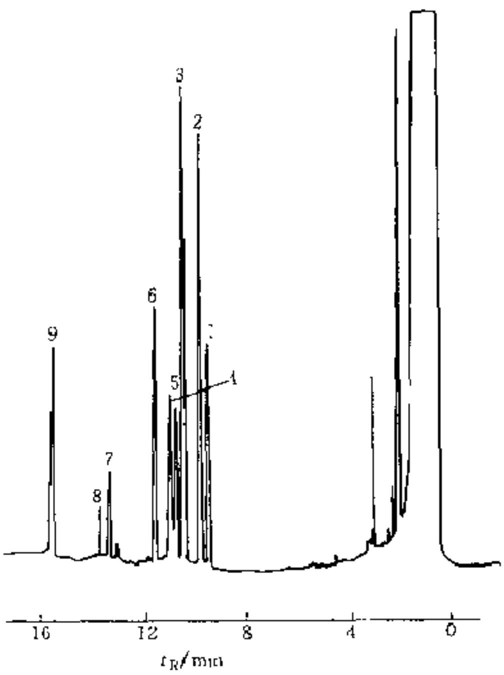
色谱峰：1—丙氨酸；2—甘氨酸；3—尿素；4—亮氨酸；5—内标物；6—尿素(?)；7—肌酸酐；8—丝氨酸；9—苏氨酸；10—苯丙氨酸；11—天冬氨酸；12—3-甲基-L-组氨酸；13—谷氨酸；14—鸟氨酸；15—天冬酰胺；16—赖氨酸；17—组氨酸；18—酪氨酸；19—色氨酸

色谱柱：HP-1，50m×0.2mm，d_f=0.25μm

柱　温：40℃(1min)→145℃(3min)，70℃·min^{-1}→245℃，3℃·min^{-1}→305℃(6min)，5℃·min^{-1}

载　气：程序升载气，详见原文

检测器：FID



色谱峰：1—雄酮(?)；2—雄甾酮；3—11-氧代本胆烷醇酮；4—雌甾酮；5—雌甾二醇；6—孕甾二醇；7—孕甾三醇；8—Δ^5-孕甾三醇；9—胆甾醇

色谱柱：SE-54，15m×0.32mm

柱　温：50℃→180℃，40℃·min^{-1}→280℃，8℃·min^{-1}

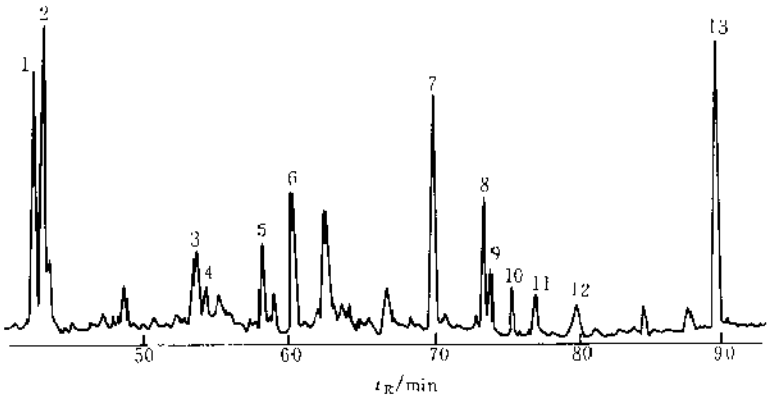
载　气：H_2，30kPa

检测器：FID

气化室温度：280℃

检测器温度：290℃

图 27-17 尿中甾族化合物[17]



色谱峰：1—雄甾酮；2—5β-雄酮；3—11 羟基雄甾酮；4—11-羟基-5β-雄酮；5—孕二醇；6 孕三醇；7 四氢化可的松；8 四氢化可的松；9—别四氢化可的松；10 孕烷四醇酮；11—β-孕烷四醇酮；12 孕烷五醇；13—内标物

色谱柱：SE 30，60m×0.3mm

柱 温：220°C，1°C·min⁻¹

载 气：He

检测器：FID

图 27-18 尿中甾族化合物（TMS 与 MO-TMS 衍生物）[18]

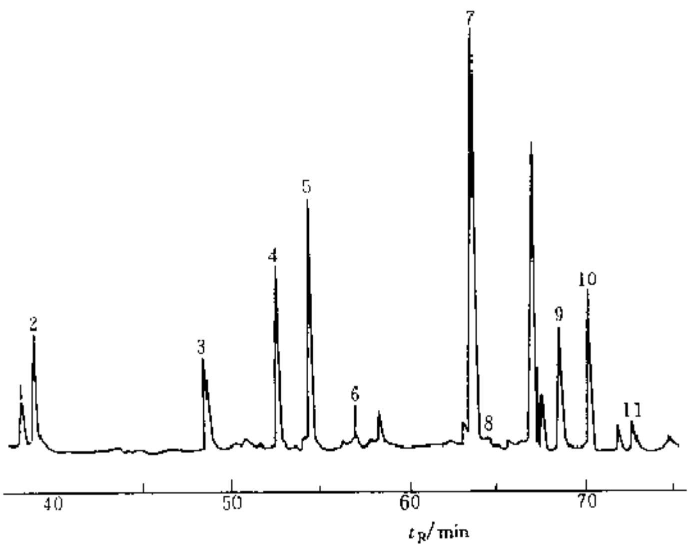


图 27-19 妇女尿中甾体代谢物（MO-TMS 衍生物）[19]

色谱峰：1—雄甾酮；2 初胆酮；3—11-羟基雄甾酮；4—娠烷二醇；5 娠烷三醇；6—雄甾 5 烷 3β,6α,17β-三醇；7 四氢皮质激酮；8 −5β 娠烷-3α,2,1-三醇 11,20-二酮；9- 皮甾酮四醇；10 β-皮甾酮四醇；11—皮甾五醇；

色谱柱：SE 30，60m

柱 温：10°C→200°C，1°C·min⁻¹

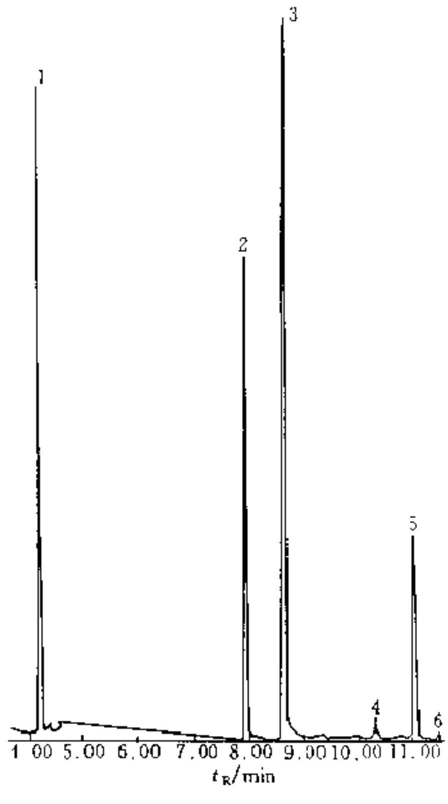


图 27-20 尿中麻醉剂（BSTFA-TMCS 衍生物）[22]

色谱峰：1—爱康宁甲酯；2—可卡因；3—苯酰爱康宁；4 可待因；5—吗啡；6—6-单乙酰吗啡

色谱柱：HP-1，12m×0.2mm，d_f=0.33μm

柱 温：120°C(1min)→220°C，20°C·min⁻¹→260°C，5°C·min⁻¹→280°C(2 min)，20°C·min⁻¹

检测器：MS

气化室温度：250°C

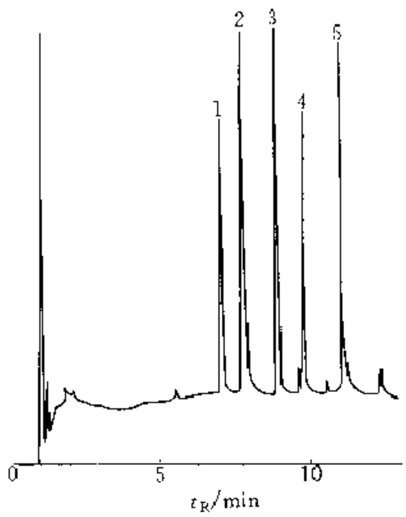


图 27-21　尿中β-受体阻滞药[20]

色谱峰：1—烯丙心安；2—烯丙氧心安；3—甲氧乙心安；4—萘心安；5—醋丁酰心安

色谱柱：SE-30，25m×0.32mm，d_f=0.25μm

柱　温：140℃→260℃(5min)，10℃·min⁻¹

载　气：H_2，$\bar{u}$=50cm·s^{-1}（140℃）

检测器：ECD

气化室温度：260℃

检测器温度：300℃

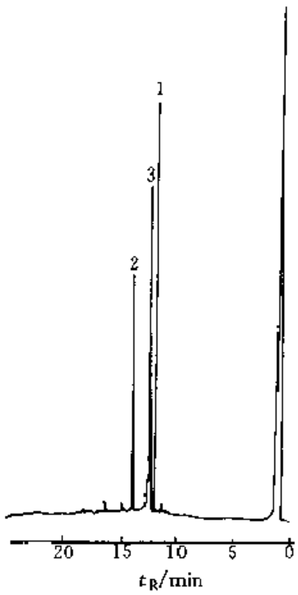


图 27-22　尿中度冷丁及代谢物[21]

色谱峰：1—度冷丁；2—内标物；3—新哌嗒啶

色谱柱：SE-54，24m×0.24mm，d_f=0.25μm

柱　温：100℃→250℃(8min)，10℃·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：260℃

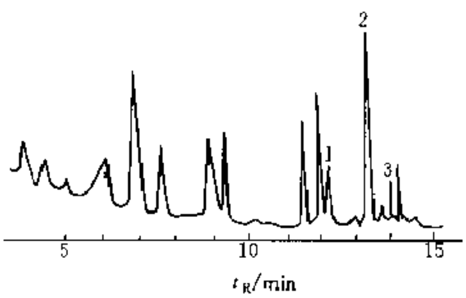


图 27-23　人尿中可待因

（MSTFA-MBTFA 衍生物）[23]

色谱峰：1—双氢可待因；2—可待因；3—吗啡

色谱柱：SE-54，25m×0.2mm，d_f=0.32μm

柱　温：180℃→220℃，10℃·min^{-1}→260℃，5℃·min^{-1}→280℃(10min)，10℃·min^{-1}

载　气：He，0.95ml·min^{-1}（180℃）

检测器：MS

气化室温度：250℃

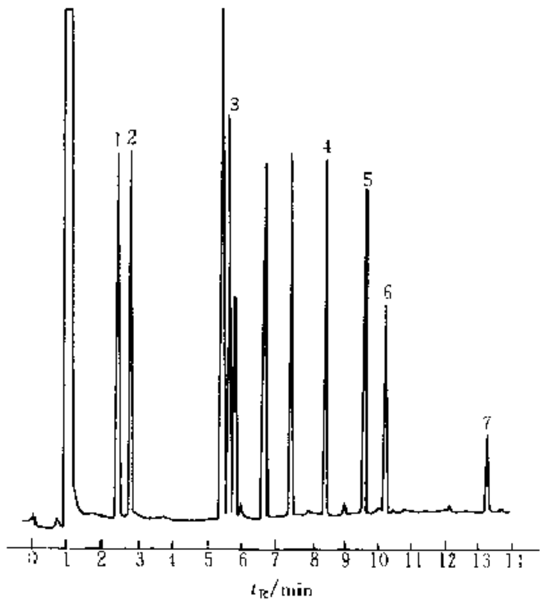


图 27-24　尿中镇痛药[24]

色谱峰：1—苯丙胺；2—尼古丁；3—氯苯叔丁胺；4—内标；5—利他灵；6—咖啡因；7—美沙酮

色谱柱：SP-2100，25m

柱　温：110℃(4min)→220℃，16℃·min^{-1}

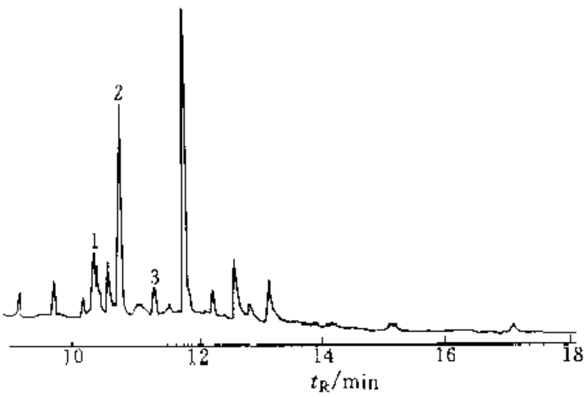


图 27-25　吸毒者尿样

(硅烷化衍生物)[25]

色谱峰：1—甲基吗啡；2—吗啡；3—6-单乙酰基吗啡
色谱柱：SE-54，23m×0.26mm
柱　温：100℃(2min)→260℃(12min)，10℃·min^{-1}
检测器：MS

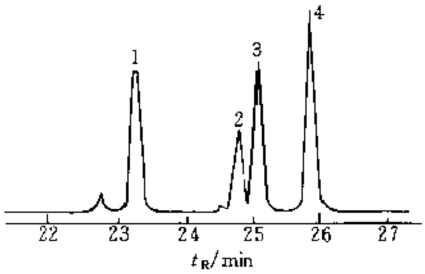


图 27-26　人尿中诺龙和炔诺酮代谢物

(MSTFA 衍生物)[27]

色谱峰：1—19-去甲雄酮；2—19-去甲表雄烷醇酮；3—19-去甲雄烷醇酮；4—19-去甲表雄酮
色谱柱：HP-5，17m×0.2mm，d_f=0.33μm
柱　温：180℃→240℃(10min)，2℃·min^{-1}
载　气：He
检测器：MS
气化室温度：280℃

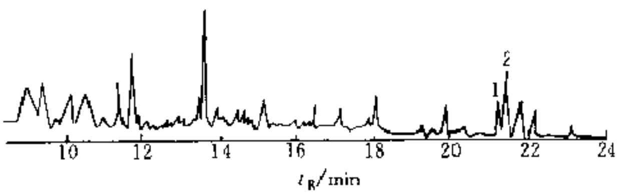


图 27-27　人尿中吗散痛

(MSTFA＋MBTFA 衍生物)[28]

色谱峰：1—吗散痛；2—吗散痛代谢产物
色谱柱：HP-5，25m×0.2mm
柱　温：180℃→220℃，10℃·min^{-1}→260℃，5℃·min^{-1}→280℃，10℃·min^{-1}
载　气：He
检测器：MS
气化室温度：250℃

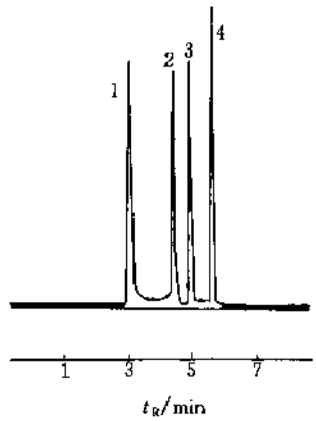
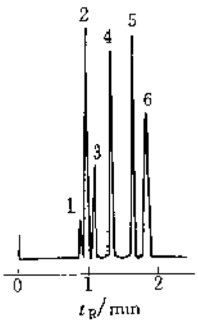


图 27-28　尿中异喹胍[28]

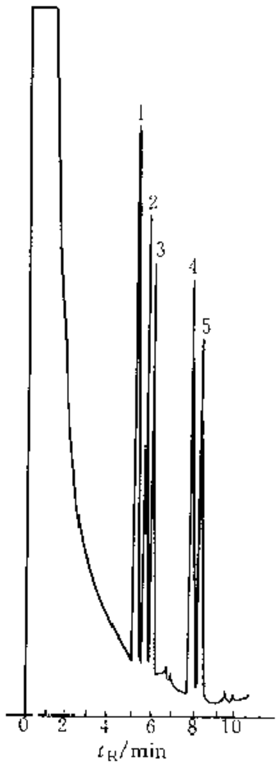
色谱峰：1—异喹胍；2—胍生(内标物)；3—4-羟基异喹胍；4—8-羟基异喹胍
色谱柱：RSL-200，25m×0.32mm，d_f=0.3μm
柱　温：195℃→250℃(2min)，5℃·min^{-1}
载　气：He，0.9ml·min^{-1}
检测器：MS

第二节　血液与其他体液的色谱图



色谱峰：1—甲醇；2—乙醛；3—乙醇；4—异丙醇；5—丙酮；6—正丙醇
色谱柱：Rtx-BACl，30m×0.53mm，d_f=3.0μm
柱　温：40℃
载　气：He，$\bar{u}$=80cm·s^{-1}(40℃)

图 27-29　血中醇[30]



色谱峰：1—乙二醇；2—丙二醇；3—2,3-丁二醇；4—1,3-丙二醇（内标物）；5—1,3-丁二醇

色谱柱：DB5，10m×0.53mm，d_f=1.5μm

柱　温：70℃（0.5min）→120℃，20℃·min^{-1}→150℃，5℃·min^{-1}→250℃（0.5min），20℃·min^{-1}

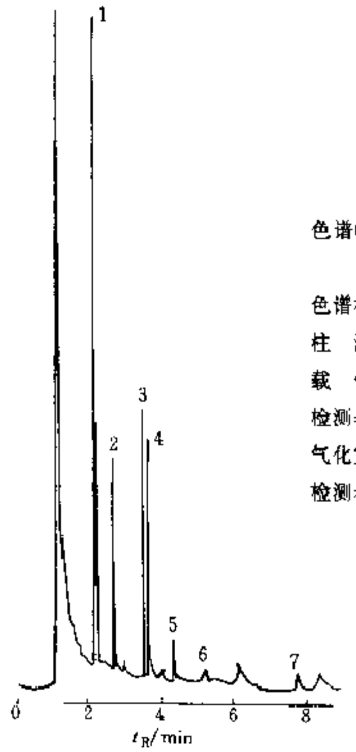
载　气：N_2

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：300℃

图 27-30　血清中聚酯[31]



色谱峰：1—乙酸；2—丙酸；3—正丁酸；4—丙烯酸；5—间丙烯酸；6—正戊酸；7—正己酸

色谱柱：FFAP，25m×0.32mm，d_f=0.3μm

柱　温：130℃

载　气：He，2.6ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：200℃

检测器温度：200℃

图 27-31　鼠血浆中脂肪酸[32]

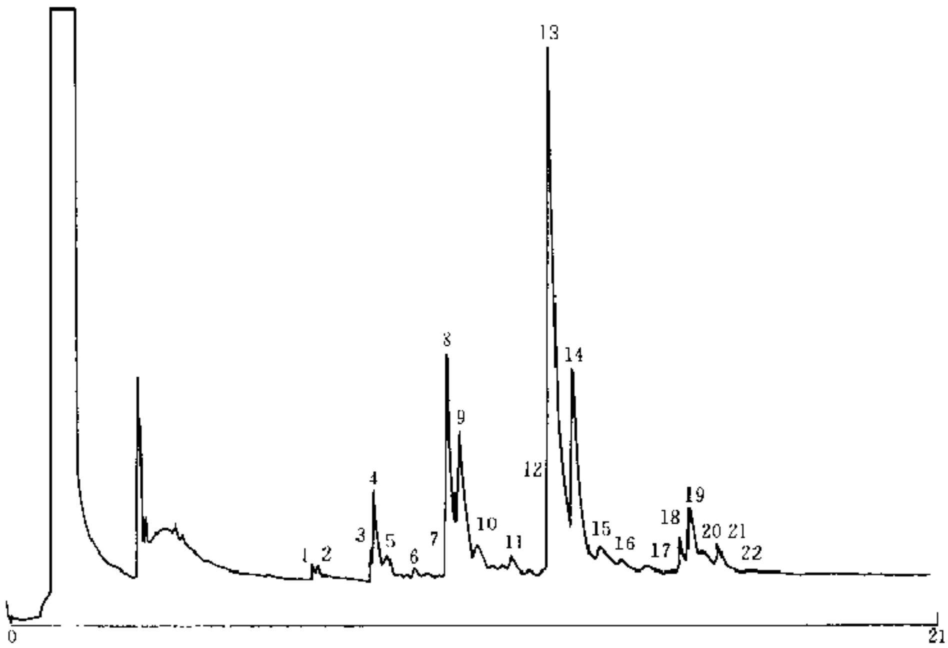


图 27-32　血中甘油三酯（甲酯衍生物）[11]

色谱峰❶：1—MPP；2—MMO+MPPo；3—PPP；4—PPPo；5—MPoO+MPL；6—PdPoS；7—PPS；8—PPO；9—PPoO+PPL；10—PPoL；11—PdOS；12—PSO；13—POO；14—POL；15—PLL+PoOL；16—HdOO；17—SSO；18—SOO；19—OOO；20—SOL；21—OOL；22—OLL

❶脂肪酸酯的符号　M—十四烷酸酯；O—油酸酯；Po—棕榈油酸酯；L—亚油酸酯；Pd—十五烷酸酯；P—十六烷酸酯；Hd—十七烷酸酯；S—十八烷酸酯

色谱柱：CP Wax 52，10m×0.25mm，d_f=0.2μm　　载　气：H_2　　气化室温度：320℃

柱　温：320℃→350℃，1.5℃·min^{-1}　　检测器：FID　　检测器温度：375℃

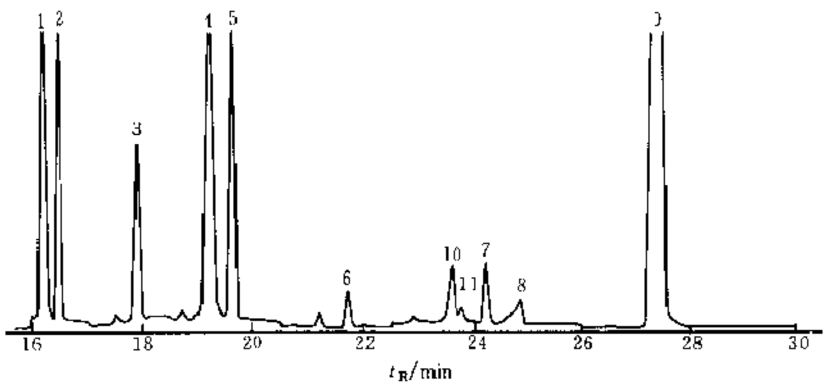


图 27-33　血浆中脂肪酸（甲酯衍生物）[34]

色谱峰：1—二十二碳-烯酸；2—正二十酸；3—正二十三酸；4—二十碳-烯酸；5—正二十四酸；6—正二十五酸；7—正二十六酸；8—胆固醇；9—正二十七酸（内标物）；10，11—二十六碳-烯酸

色谱柱：HP1，25m×0.2mm，d_f=0.5μm

柱　温：180℃（2min）→290℃（15min），10℃·min^{-1}

检测器：MS

气化室温度：280℃

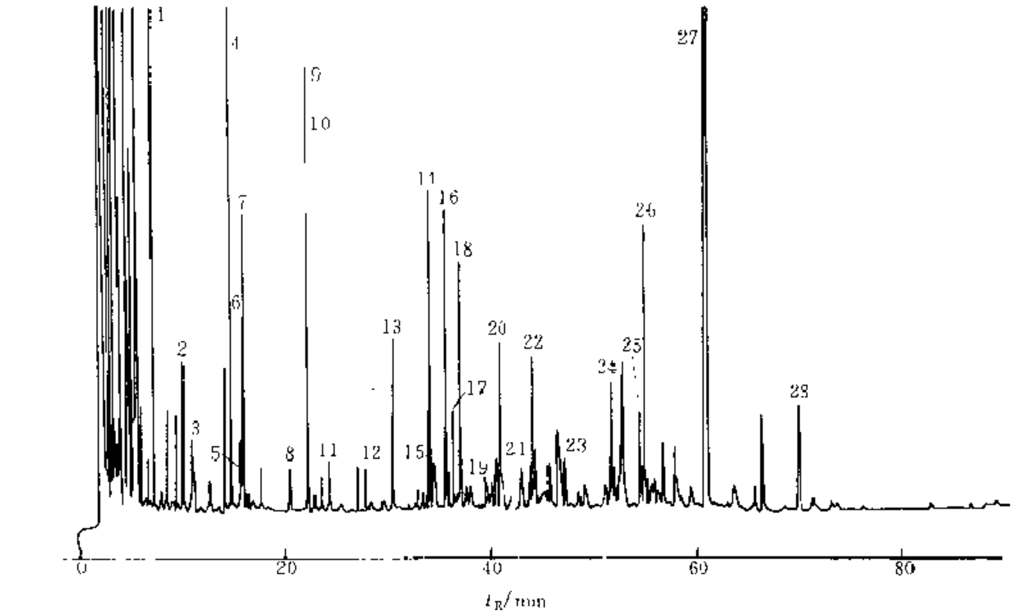


图 27-31　血浆中有机酸（甲酯衍生物）[34]

色谱峰：1—丙酮酸；2—2-氧代异戊酸；3—丁二酸；4—3-甲基-2-氧代戊酸；5—5-甲基呋喃-2-羧酸；6—甲基丁二酸；7—2-氧代异己酸；8—戊二酸；9—3-甲基戊二酸；10—苯乙酸；11—3-甲基戊烯二酸；12—己二酸；13—3-甲基己二酸；14—3,4-亚甲基己二酸；15—庚二酸；16—邻氨基苯甲酸；17—4-羟基苯甲酸；18—2-氧化戊二酸；19—2-羟基苯乙酸；20—4-羟基苯乙酸；21—3-甲基辛二酸；22—苯二酸；23—壬二酸；24—香草酸；25—高香草酸；26—癸炔二酸；27—3-羧基-4-甲基-5-丙基-2-呋喃丙酸；28—3-羧基-4-甲基-5-戊基-2-呋喃丙酸

色谱柱：OV-1701，25m　　载　气：He

柱　温：60℃→230℃，2℃·min^{-1}　　检测器：FID

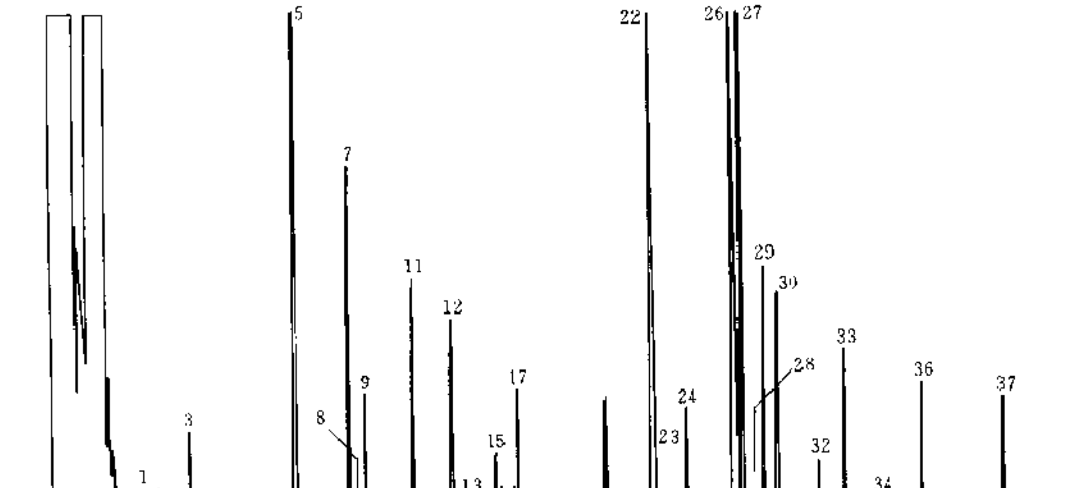


图 27-35　血中有机酸（氯甲酸乙酯衍生物）[35]

色谱峰：1—3-羟基丁酸；2—2-氧代异戊酸；3—2-氧代甲基戊酸+2-氧代异己酸；4—2-羟基乙酸；5—2-羟基丙酸；6—2-羟基丁酸；7—丙氨酸；8—2-羟基异戊酸；9—甘氨酸；10—2-氨基丁酸；11—缬氨酸；12—亮氨酸；13—异亮氨酸；14—十二酸；15—苏氨酸；16—丝氨酸；17—脯氨酸；18—天冬酰胺；19—十四酸；20—蛋氨酸；21—4-羟基脯氨酸；22—十六酸；23—十六碳-9-烯酸；24—苯丙氨酸；25—半胱氨酸；26—十八酸+油酸；27—十八碳-9,12-二烯酸；28—十八碳-9,12,15-三烯酸；29—对氯苯丙氨酸（内标物）；30—谷氨酰胺；31—鸟氨酸；32—花生四烯酸；33—赖氨酸；34—组氨酸；35—二十二碳六烯酸；36—酪氨酸；37—色氨酸；38—半胱氨酸

色谱柱：DB-17HT，30m×0.25mm，d_f=0.15μm　　载　气：H_2，50kPa　　气化室温度：240℃

柱　温：60℃→300℃（5min），6℃·min^{-1}　　检测器：FID　　检测器温度：240℃

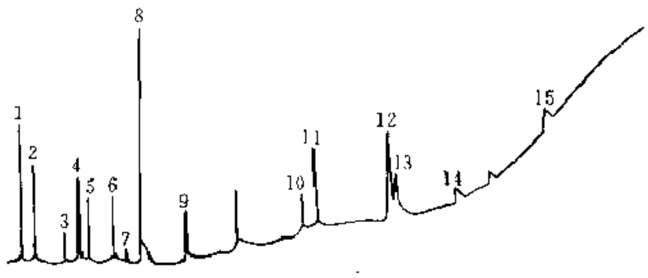


图 27-36　儿童血清中氨基酸（七氟丁酸酐衍生物）[36]

色谱峰：1—丙氨酸；2—甘氨酸；3—缬氨酸；4—苏氨酸；5—丝氨酸；6—亮氨酸；7—异亮氨酸；8—降亮氨酸（内标物）；9—脯氨酸；10—天冬氨酸；11—苯丙氨酸；12—谷氨酸；13—赖氨酸；14—精氨酸；15—色氨酸

色谱柱：SE-52，25m×0.24mm　　检测器：FID

柱　温：100℃→200℃（5min），5℃·min⁻¹→255℃（10min），10℃·min⁻¹　　气化室温度：260℃

检测器温度：260℃

载　气：N_2

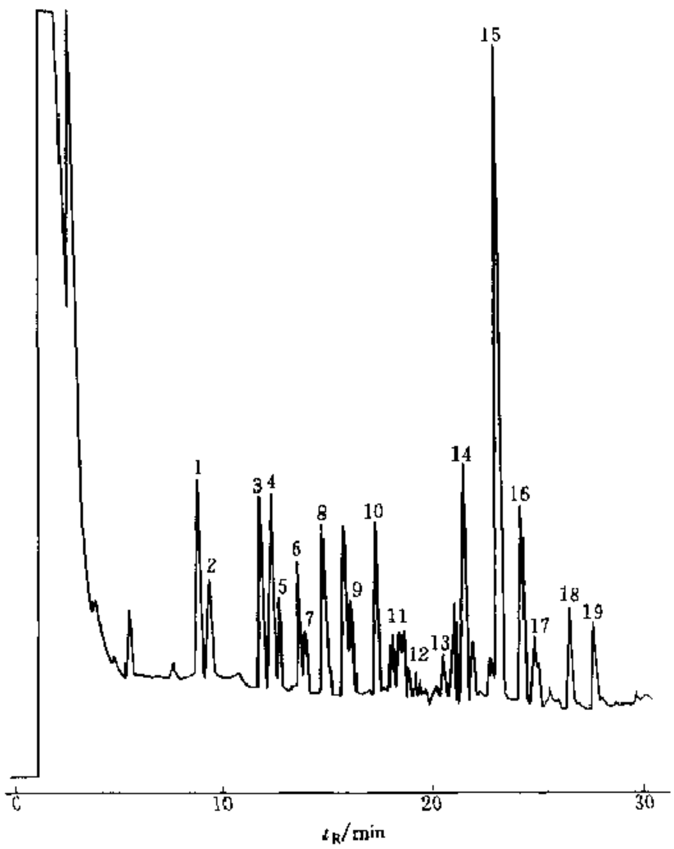


图 27-37　血浆中氨基酸（HBB 衍生物）[37]

色谱峰：1—丙氨酸；2—甘氨酸；3—缬氨酸；4—苏氨酸；5—丝氨酸；6—亮氨酸；7—异亮氨酸；8—降亮氨酸（内标物）；9—脯氨酸；10—哌可酸（内标物）；11—羟基脯氨酸；12—蛋氨酸；13—天冬氨酸；14—苯基丙氨酸；15—谷氨酸；16—赖氨酸；17—酪氨酸；18—精氨酸；19—组氨酸

色谱柱：3.5% OV-101，Supelcoport（100 目～120 目），3m×2.7mm　　检测器：FID

气化室温度：210℃

柱　温：100℃（5min）→240℃（1min），5℃·min⁻¹　　检测器温度：250℃

载　气：N_2，19ml·min⁻¹

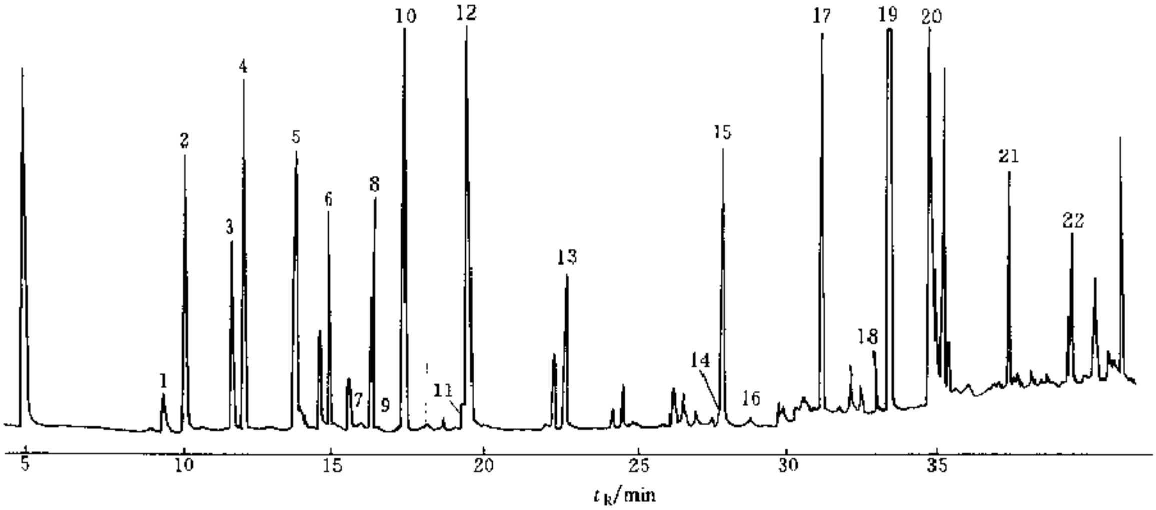


图 27-38　血清中氨基酸（PFP-丙酯衍生物）[38]

色谱峰：1—D-丙氨酸；2—L-丙氨酸；3—L-苏氨酸；4—L-缬氨酸；5—甘氨酸；6—L-异亮氨酸；7—D-丝氨酸；8—L-丝氨酸；9—D-亮氨酸；10—L-亮氨酸；11—D-脯氨酸；12—L-脯氨酸；13—BHT；14—D-天冬氨酸；15—L-天冬氨酸；16—L-蛋氨酸；17—苯丙氨酸；18—D-谷氨酸；19—L-谷氨酸；20—L-酪氨酸；21—L-鸟氨酸；22—L-赖氨酸

色谱柱：Chirasil-L-Val，25m×0.25mm
柱　温：80℃（5min）→128℃（3min），3.5℃·min^{-1}→155℃，3.5℃·min^{-1}→195℃（10min），4.5℃·min^{-1}
载　气：H_2，45kPa
检测器：FID
气化室温度：250℃
检测器温度：250℃



图 27-39　血浆中高半胱氨酸（甲酯衍生物）[39]

色谱峰：1—蛋氨酸；2—半胱氨酸；3—高半胱氨酸；4—S氨基乙基-L-半胱氨酸(内标物)；5—半胱氨酰甘氨酸
色谱柱：DB-17，15m×0.53mm，d_f＝1.0μm
柱　温：160℃→270℃，10℃·min^{-1}
载　气：N_2，10ml·min^{-1}　　检测器：FPD（硫型）
气化室温度：280℃　　检测器温度：280℃

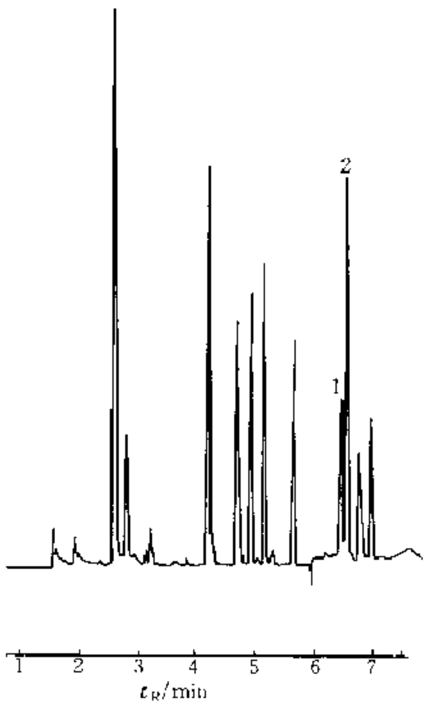
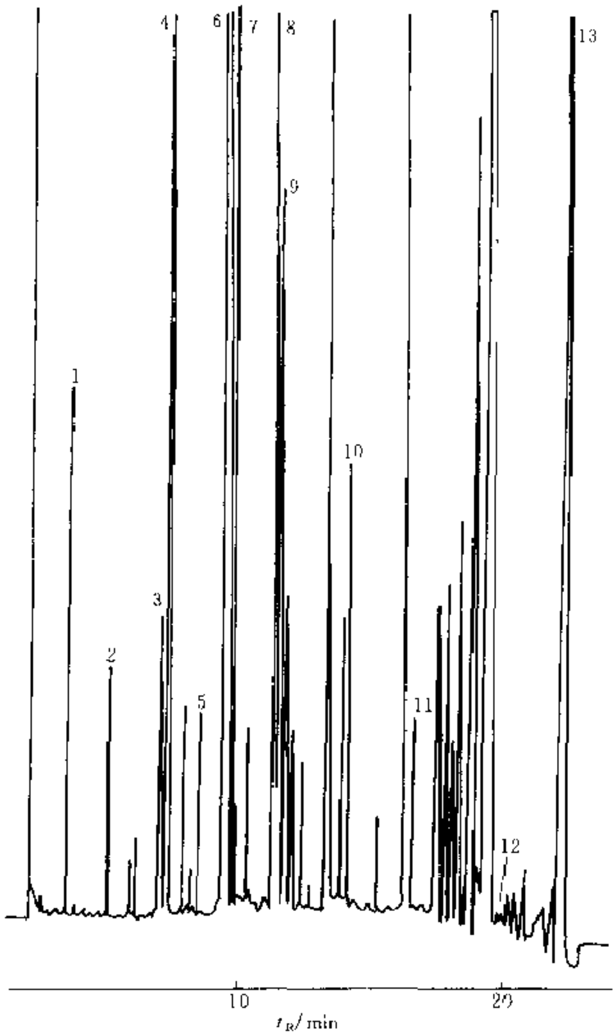


图 27-40　血中哌可酸[40]

色谱峰：1—［$^2H_{11}$］哌可酸；2—哌可酸
色谱柱：CP Sil-5，25m×0.16mm
柱　温：180℃→194℃，2℃·min^{-1}→290℃（5min），40℃·min^{-1}
载　气：He，$\bar{u}$＝36cm·s^{-1}　　检测器：ECD
气化室温度：290℃　　检测器温度：300℃



色谱峰：1—正十二酸甲酯；2—正十四酸甲酯；3—十六碳一烯酸甲酯；4—正十六酸甲酯；5—正十七酸甲酯；6—十八碳一烯酸甲酯+十八碳二烯酸甲酯；7—正十八酸甲酯；8—二十碳四烯酸甲酯；9—二十碳三烯酸甲酯；10—正二十二酸甲酯；11—正二十四酸甲酯；12—正二十六酸甲酯；13—正二十七酸甲酯

色谱柱：SE-54，36m×0.32mm

柱　温：180℃（3min）→270℃，（10min），8℃·min^{-1}

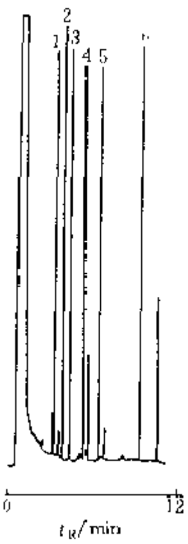
载　气：H_2，$\bar{u}$=44cm·s^{-1}

检测器：FID

气化室温度：270℃

检测器温度：270℃

图 27-41　人血浆中脂肪酸甲酯[41]



色谱峰：

1—速灭威；2—叶蝉散；3—仲丁威；4—呋喃丹；5—西维因；6—内标物

色谱柱：SE-54，25m×0.25mm

柱　温：120℃→260℃，（5min），15℃·min^{-1}

载　气：N_2，150kPa

检测器：FID

气化室温度：280℃

检测器温度：280℃

图 27-42　血浆中氨基甲酸酯[42]

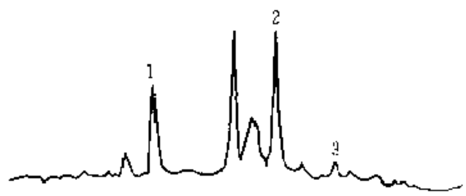


图 27-43　大鼠血中氯胺酮[43]

色谱峰：1—氯胺酮；2—二甲苯胺噻嗪；3—二乙胺基乙基苯甲酸酯（内标物）

色谱柱：DB-5，7m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱　温：80℃（1min）→250℃（15min），20℃·min^{-1}

载　气：He，1ml·min^{-1}

检测器：MS

气化室温度：250℃

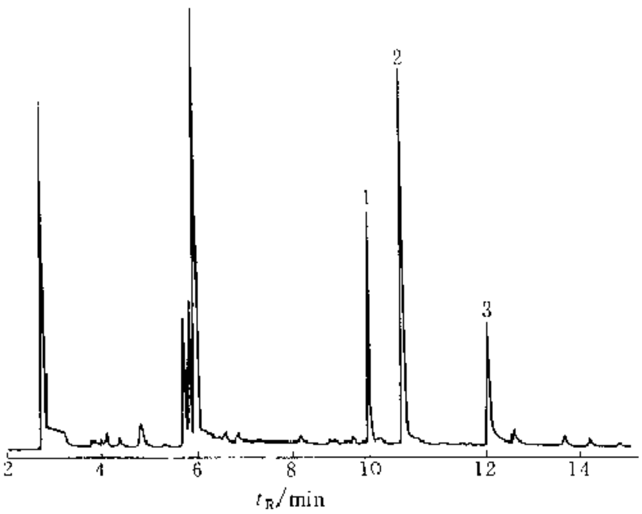


图 27-44　血中氟苯氧丙胺[44]

色谱峰：1—新氟苯氧丙胺；2—氟苯氧丙胺；3　内标物

色谱柱：DB-17，30m×0.25mm，d_f=0.15μm

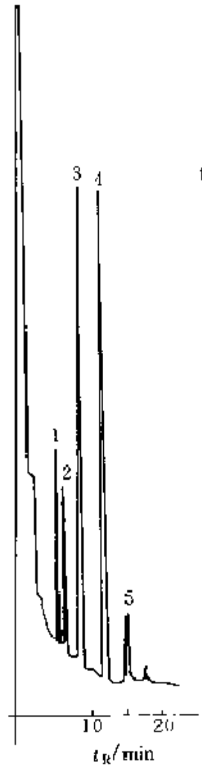
柱　温：130℃（1min）→235℃（10min），25℃·min^{-1}→270℃（5min），25℃·min^{-1}

载　气：Ar-CH_4（体积比为 95：5）

检测器：ECD

气化室温度：250℃

检测器温度：325℃



色谱峰：
1—三甲丙咪嗪；2　去甲三甲丙咪嗪；3—麦普替林（内标物）；4—氯丙咪嗪（内标物）；5—2-羟基三甲丙咪嗪

图 27-45　血中三甲丙咪嗪[45]

色谱柱：OV-1，25m×0.32mm，d_f=0.2μm

柱　温：195℃

载　气：He，2.5ml·min^{-1}

检测器：NPD　　气化室温度：280℃

检测器温度：280℃

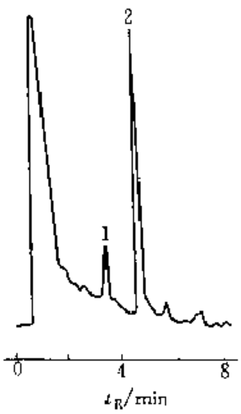


图 27-46　血清中槐定碱[46]

色谱峰：1—槐定碱；2—槐胺碱（内标物）

色谱柱：OV-101，25m×0.22mm

柱　温：260℃　　　　载　气：N_2

检测器：FID　　　　气化室温度：290℃

检测器温度：290℃

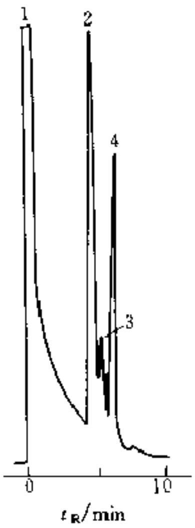


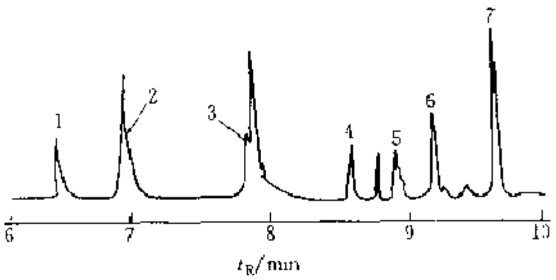
图 27-47　人血浆中敌敌畏[47]

色谱峰：1　二氯甲烷+环己烷（提取液）；2—敌敌畏；3—未知峰；4—磷酸三丁酯（内标）

色谱柱：2% QF-1，Chromosorb G AW-DMCS（80 目～100 目），2m×3mm

柱　温：100℃（1min）→200℃，20℃·min^{-1}

载　气：N_2，25ml·min^{-1}　　检测器：FPD



色谱峰：

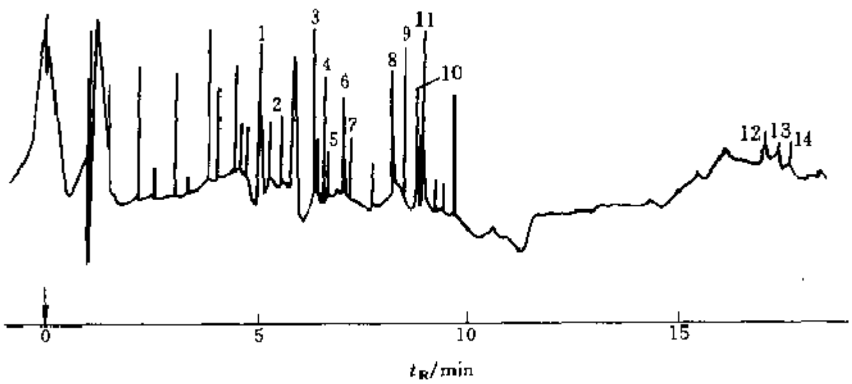
1—氯灭酸；2—氮氟灭酸；3—甲火酸；4—一氯灭酸；5—氯胺烟酸；6—甲氯灭酸；7—二氯灭酸丙酯（内标物）

图 27-48　血浆中抗炎药（甲酯衍生物）[48]

色谱柱：DB-5，30m×0.25mm，d_f=0.25μm　　检测器：离子选择检测器

柱　温：150°C（2min）→260°C（8min），20°C・min⁻¹　　气化室温度：250°C

载　气：He，1ml・min⁻¹



色谱峰：

1—抗感明；2—苯海拉明；3—吡苄明；4—氯苯吡胺；5—二苯甲甲哌嗪；6—吡氯苄；7—溴苯吡胺；8—抗5-色胺；9—新安替根；10—非那根；11—7-甲基-抗5-色胺；12—盐酸氯苯甲嗪；13—噻唑啉氟硝唑唑；14—肉桂苯哌嗪

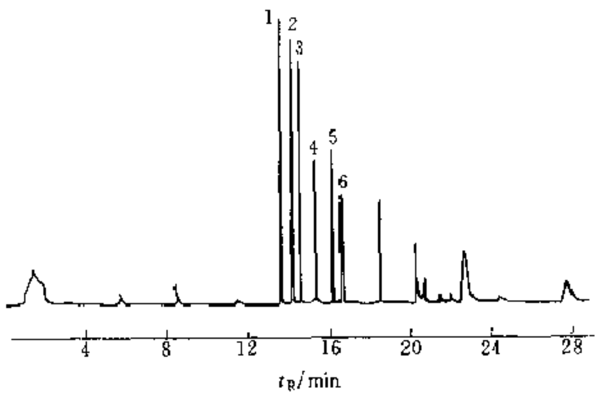
图 27-49　血浆中抗组胺药（一）[49]

色谱柱：CP-Sil 5，26m×0.32mm，d_f=0.13μm　　检测器：NPD

柱　温：140°C（1min）→225°C（1min），20°C・min⁻¹→260°C（13min），20°C・min⁻¹　　气化室温度：250°C

检测器温度：275°C

载　气：He，3.5ml・min⁻¹



色谱峰：1—苯海拉明；2—苯吡甲醇胺；3—邻甲苯海拉明；4—氯苯吡胺；5—氯苯吡醇胺；6—二苯甲氧甲哌啶

色谱柱：DB-1，30m×0.32mm，d_f=0.25μm

柱　温：100°C→280°C，8°C・min⁻¹

载　气：He，$\bar{u}$=22cm・s⁻¹

检测器：MS

气化室温度：280°C

图 27-50　血中抗组胺药（二）[50]

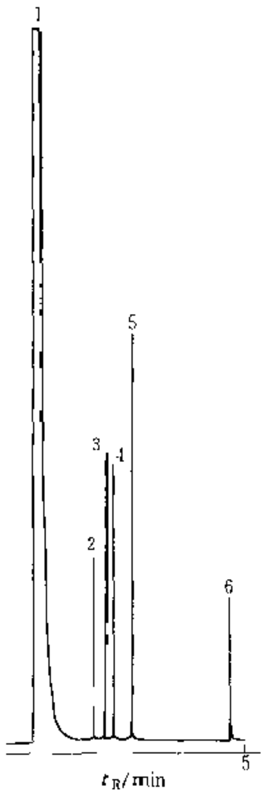


图 27-51 血中兴奋药

色谱峰：1—苯乙胺；2—苯丙胺；3—苯丁胺；4—甲基苯丙胺；5—金刚胺（内标物）；6—苯甲吗啉

色谱柱：DB-5，25m×0.25mm，d_f=0.2μm

柱　温：100℃→150℃，5℃·min⁻¹

载　气：He，$\bar{u}$=40cm·s⁻¹

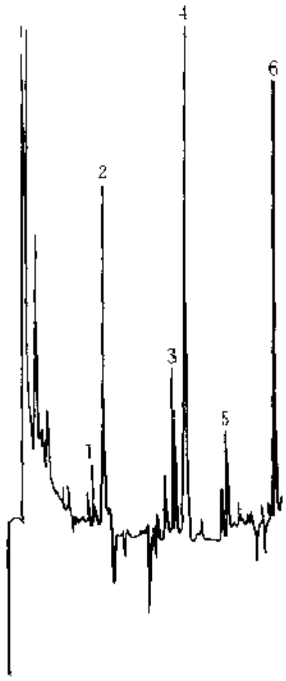


图 27-52 血浆中抗心绞痛药及代谢物（一）

色谱峰：1—1-甘油单硝酸酯；2—2-甘油单硝酸酯；3—1,3-甘油二硝酸酯；4—1,2-甘油二硝酸酯；5—硝化甘油；6—内标物

色谱柱：DB-1，30m×0.32mm，d_f=1μm

柱　温：120℃（10min）→165℃，10℃·min⁻¹→280℃（4min），30℃·min⁻¹

载　气：H_2

检测器：ECD

检测器温度：260℃



图 27-53 血浆中抗心绞痛药及代谢物（二）

色谱峰：1—硝化甘油（内标物）；2—2-异山梨醇单硝酸酯；3—5-异山梨醇单硝酸酯；4—异山梨醇二硝酸酯

色谱柱：BP-1，25m×0.32mm，d_f=0.5μm

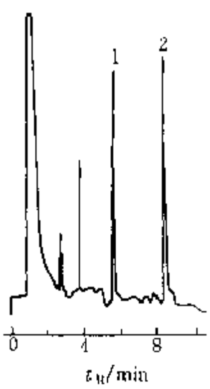
柱　温：110℃→110℃，15℃·min⁻¹

载　气：He

检测器：ECD

气化室温度：150℃

检测器温度：230℃



色谱峰：1—单硝酸异山梨酯；2—消心痛（内标物）

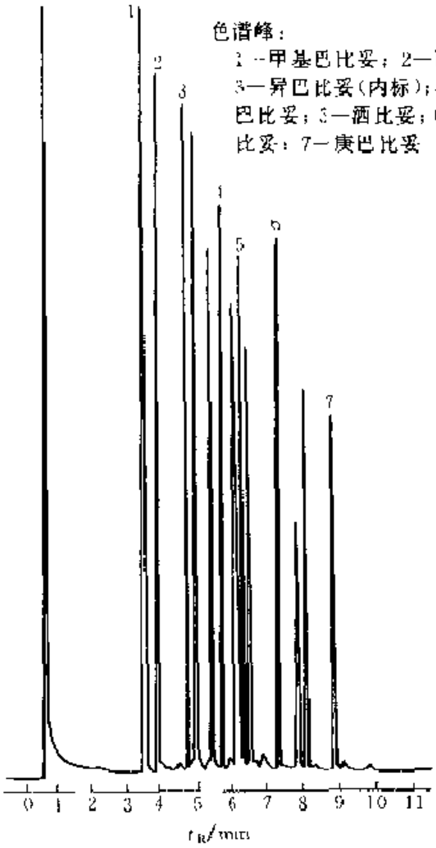
色谱柱：SE-54，31m×0.22mm

柱　温：145℃

载　气：N_2　　检测器：ECD

气化室温度：230℃　　检测器温度：230℃

图 27-54 血浆中单硝酸异山梨酯



色谱峰：
1—甲基巴比妥；2—巴比妥；3—异巴比妥(内标)；4—氯基巴比妥；5—硒比妥；6—己巴比妥；7—庚巴比妥

图 27-55 血浆中巴比妥酸（烷基衍生物）[55]

色谱柱：SP 2100，25m×0.2mm
柱 温：110°C→230°C（5min），10°C·min^{-1}
载 气：N_2，0.8ml·min^{-1}
检测器：NPD
气化室温度：230°C

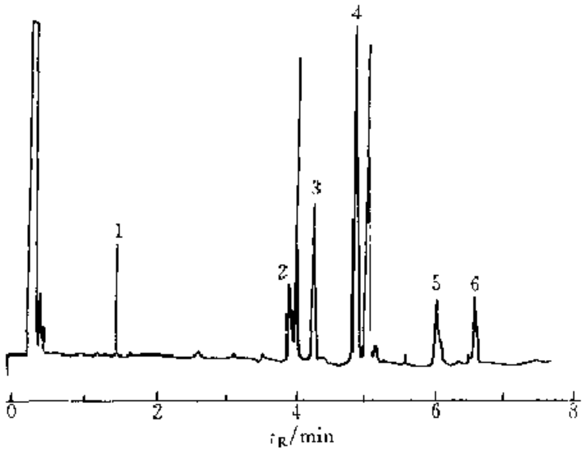
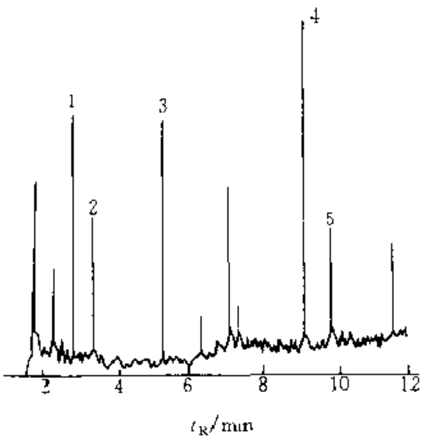


图 27-56 血浆中抗癫痫药[56]

色谱峰：1—乙琥胺；2—苯基乙基丙二酰胺；3—苯巴比妥；4—对甲基苯巴比妥；5—扑痫酮；6—卡巴咪嗪
色谱柱：HP 5，25m×0.31mm，d_f=0.52μm
柱 温：90°C→200°C，40°C·min^{-1}→250°C，10°C·min^{-1}
载 气：H_2
检测器：FID
气化室温度：90°C
检测器温度：300°C
进样方式：柱头进样



27-57 血浆中可卡因（PFP 衍生物）[57]

色谱峰：1—爱康宁；2—甲基爱康宁；3—异丙基爱康宁（内标物）；4—苯甲酰爱康宁；5—可卡因
色谱柱：DB 1，30m×0.32mm，d_f=0.25μm
柱 温：130°C→110°C，2°C·min^{-1}→258°C，17°C·min^{-1}
载 气：He，$\bar{u}$=50cm·s^{-1}
检测器：MS
气化室温度：250°C

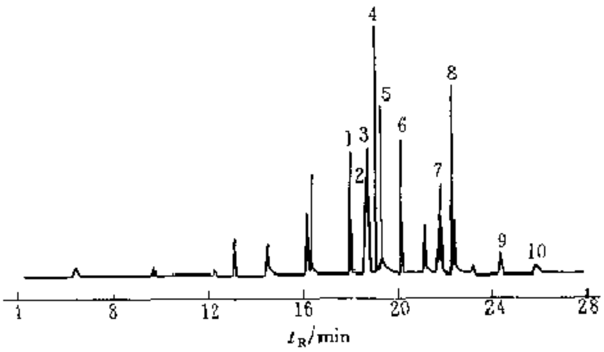


图 27-58 血中安定药[58]

色谱峰：1—二氯丙嗪；2—氯异丙嗪；3—异丙嗪；4—异丁嗪；5—丙嗪；6—二乙异丙嗪；7—冬眠灵；8—甲氧异丁嗪；9—甲哌氯丙嗪；10—丙拉嗪
色谱柱：DB 1，30m×0.32mm，d_f=0.25μm
柱 温：120°C→280°C，6°C·min^{-1}
载 气：He，$\bar{u}$=22cm·s^{-1}
检测器：MS
气化室温度：260°C

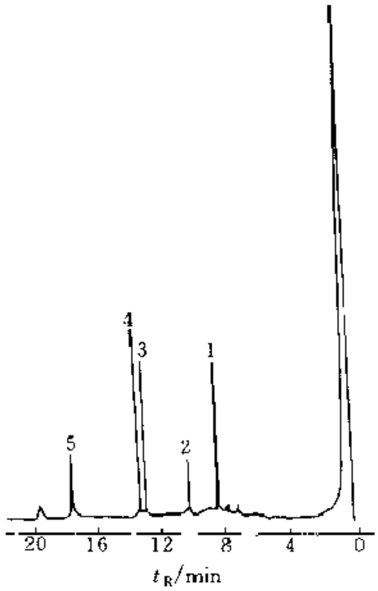


图 27-59　血浆中局麻药[59]

色谱峰：1—利多卡因；2—普鲁卡因；3—丁哌卡因；4—内标；5—地布卡因
色谱柱：SE-54，23m×0.26mm
柱　温：150℃→270℃（10min），10℃·min^{-1}
检测器：FID
气化室温度：250℃
检测器温度：280℃

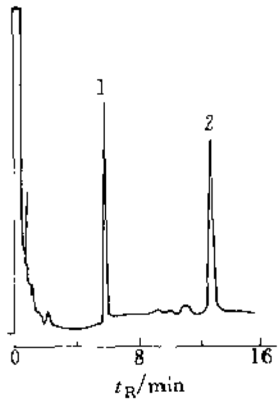


图 27-60　大白鼠血浆中茵陈有效成分[60]

色谱峰：1—茵陈酮；2—厚朴酚（内标物）
色谱柱：4% FFAP，Gas Chrom（80 目～100 目），2m×4mm
柱　温：240℃
载　气：N_2，35ml·min^{-1}
检测器：FID
气化室温度：270℃
检测器温度：250℃

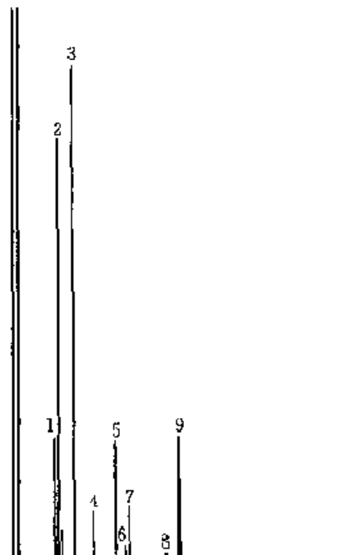


图 27-61　血中单端孢霉烯族毒素[61]

色谱峰：1—蔗草镰刀菌烯醇；2—脱氧雪腐镰刀菌烯醇；3—镰刀菌烯酮 X；4—3-乙酰脱氧雪腐镰刀菌烯醇；5—4,15 二乙酰雪腐镰刀菌烯醇；6—新茄病镰刀菌烯醇；7—二乙酰蔗草镰刀菌烯醇；8—3,15 二乙酰脱氧雪腐镰刀菌烯醇；9—HT-2；10—T-2
色谱柱：SE-54，22m×0.3mm
柱　温：200℃（5min）→220℃（40min），3℃·min^{-1}
载　气：N_2　　检测器：ECD
气化室温度：300℃　检测器温度：300℃

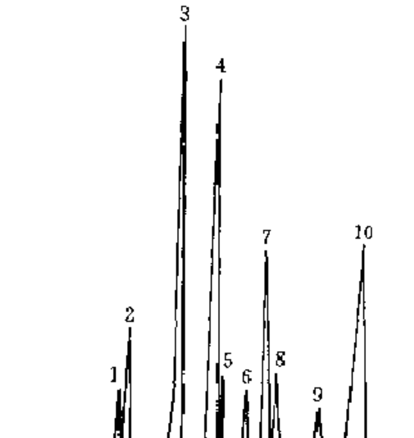


图 27-62　抗坏血酸降解产物（TMS 衍生物）[62]

色谱峰：1—木糖（α-呋喃型）；2—木糖（β-呋喃型）；3—木糖（α-吡喃型）；4—木糖（β-吡喃型）；5，9—2,3-二酮-L-古洛糖酸；6—去氢抗坏血酸；7，8—酮-L-古洛糖酸；10—抗坏血酸
色谱柱：SE-54，30m×0.2mm
柱　温：100℃（2min）→215℃（15min），10℃·min^{-1}
检测器：MS

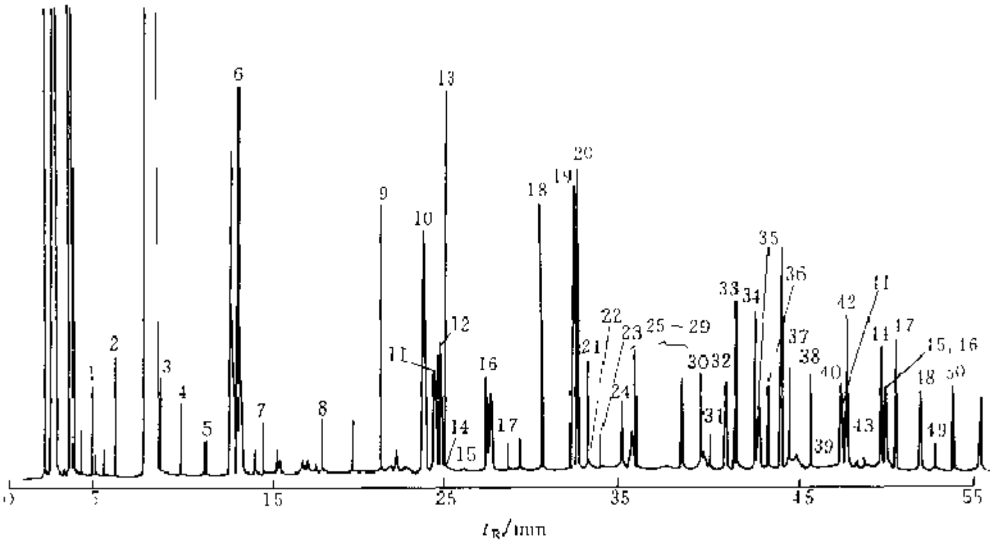


图 27-63　唾液中有机酸（叔丁基二甲基硅烷衍生物）[61]

色谱峰：1—甲酸；2—乙酸；3—丙酸；4—异丁酸；5—丁酸；6—异戊酸；7—戊酸；8—己酸；9—庚酸；10—苯甲酸；11—辛酸；12—乳酸；13—苯乙酸；14—乙醇酸；15—乙二酸；16—壬酸；17—丙二酸；18—癸酸；19—丁二酸；20—甲基琥珀酸；21—十一酸；22—富马酸；23—5-苯戊酸；24—对苯基苯甲酸；25—十二（烷）酸；26—扁桃酸；27—己二酸；28—3-甲基己二酸；29—十三（烷）酸；30—苯乳酸；31—马尿酸；32—肉豆蔻酸；33—对羟基苯甲酸；34—苹果酸；35—辛二酸；36—十五酸；37—香草酸；38—十六（烷）酸；39—丁香酸；40—酒石酸；41—十七（烷）酸；42—α-间苯二酸；43—羟基扁桃酸；44—γ-间苯二酸；45—十八（烷）酸；46—2,5-二羟苯乙酸；47—3,4-二羟苯甲酸；48—十九酸；49—柠檬酸；50—廿烷酸

色谱柱：DB-1，30m×0.32mm，d_f=0.25μm　　检测器：FID

柱　温：60℃（2min）→280℃，4℃·min^{-1}　　气化室温度：300℃

载　气：N_2，0.9ml·min^{-1}　　检测器温度：300℃

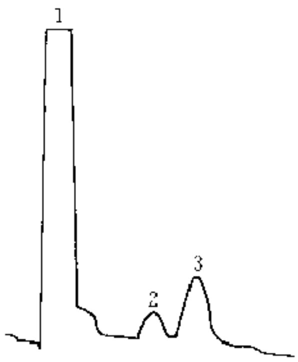


图 27-64　唾液中安定药[64]

色谱峰：1—苯（溶剂）；2—三氯杀螨砜；3—安定

色谱柱：1.5% OV-275，101 酸洗担体（100 目～120 目），1m×2mm

柱　温：225℃

载　气：N_2，55ml·min^{-1}

检测器：ECD

气化室温度：250℃

检测器温度：270℃

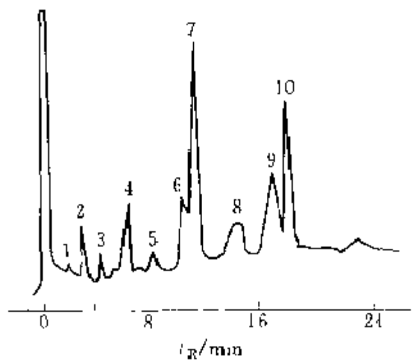


图 27-65　奇异变形杆菌所致脑膜炎的脑脊液（甲酯衍生物）[65]

色谱峰：1—十一酸；2—十二酸；3—十三酸；4—十四酸；5—十五酸；6—十六碳烯酸；7—十六酸；8—十七酸；9—十八碳烯酸；10—十八酸

色谱柱：SE-30，Chromosorb W AW-DMCS（80 目～100 目），3m×3mm

柱　温：180℃→240℃，2℃·min^{-1}

载　气：N_2，50ml·min^{-1}　　检测器：FID

气化室温度：260℃　　检测器温度：260℃

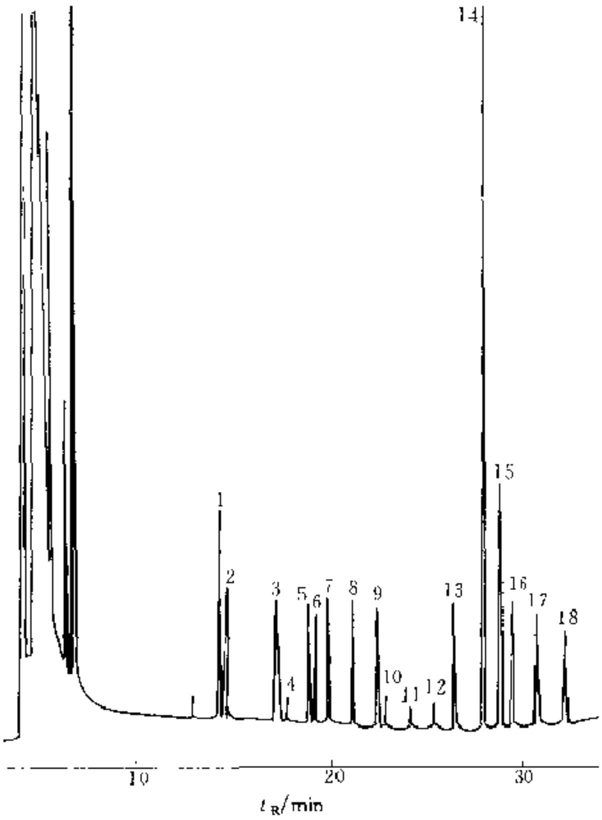


图 27-66 人脑脊髓氨基酸（HBB衍生物）[66]

色谱峰：1—丙氨酸；2—甘氨酸；3—缬氨酸+苏氨酸；4—丝氨酸；5—亮（白）氨酸；6—异亮氨酸；7—正亮氨酸；8—脯氨酸；9—2-哌啶酸；10—氢化脯氨酸；11—蛋氨酸；12—氨羰丙酸；13—苯丙氨酸；14—谷氨酸；15—赖氨酸；16—酪氨酸；17—精氨酸；18—组氨酸

色谱柱：SPB-1，30m×0.75mm，d_f=1μm

柱　温：100℃（5min）→250℃，5℃·min^{-1}

载　气：N_2，2.5ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：180℃

检测器温度：250℃

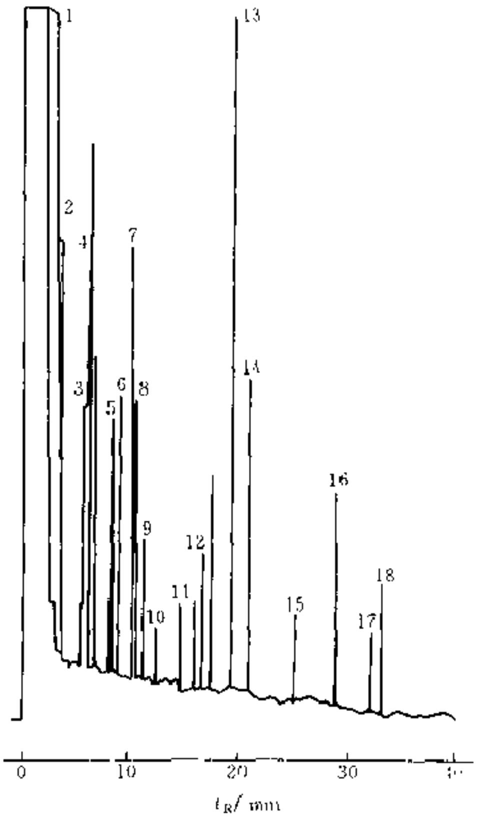


图 27-67 羊水（有机酸硅烷化衍生物）[67]

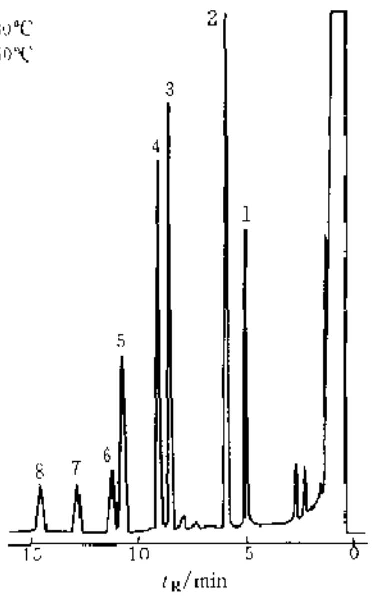
色谱峰：1—乳酸；2—羟基乙酸；3—草酸；4—丙酮酸；5—甲基丙二酸；6—2-羟基异己酸；7—邻羟基苯甲酸；8—马来酸；9—丁二酸；10—反-丁烯二酸；11—3-甲基戊二酸；12—己二酸；13—托品酸（内标物）；14—对羟基苯乙酸；15—柠檬酸；16—对羟基苯丙酮酸；17—油酸；18—十八烷酸

色谱柱：SE-54，36m×0.32mm，d_f=0.25μm

柱　温：90℃（5min）→260℃（10min），5℃·min^{-1}

载　气：H_2　检测器：FID

气化室温度：250℃　检测器温度：270℃



色谱峰：1—胆甾醇；2—胆汁酸；3—脱氧胆酸；4—鹅脱氧胆酸；5—猪脱氧胆酸（内标）；6—石胆酸；7—乌索脱氧胆酸；8—3β-羟基-5-胆烯酸

色谱柱：PEG-20M，20m

柱　温：230℃

载　气：H_2，4.4ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：300℃

图 27-68 胆汁酸（TMS衍生物）[68]

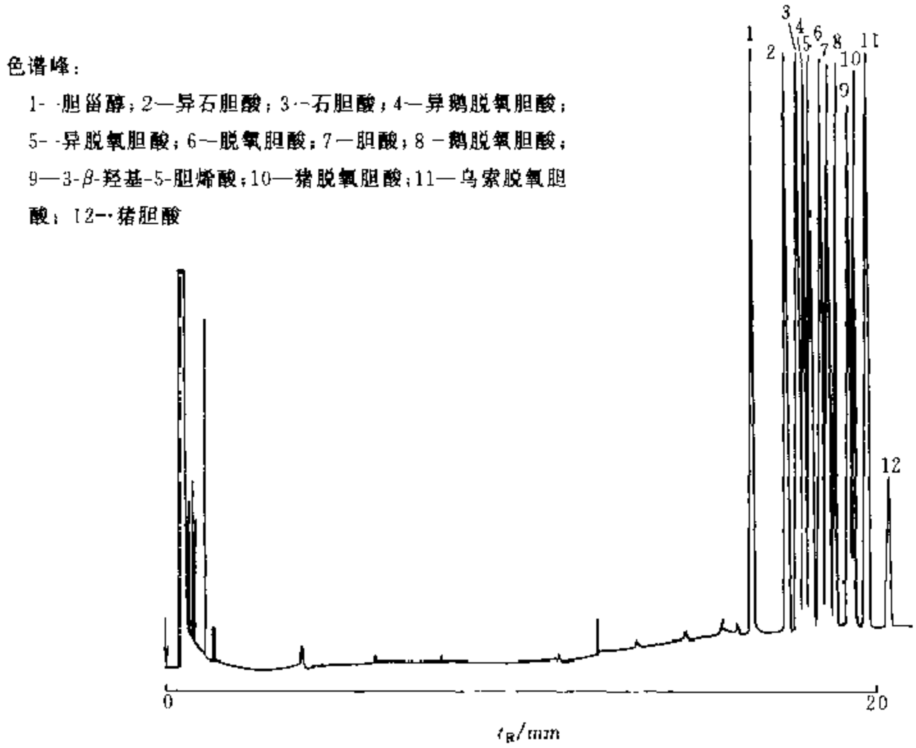


图 27-69　羟基胆汁酸与胆甾醇[69]

色谱柱：CP Sil 19 CB，25m×0.32mm，d_f=0.2μm　　检测器：FID

柱　温：140℃ (1min) →270℃，10℃·min^{-1}　　气化室温度：140℃

载　气：H_2，70kPa

第三节　组织与细菌类物质的色谱图

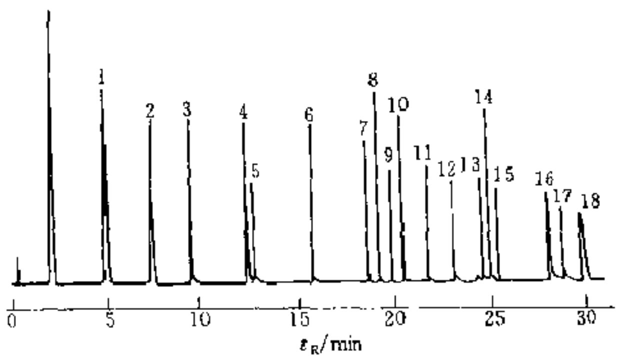


图 27-70　大白鼠生物膜磷脂水解物（甲酯衍生物）[70]

色谱峰：1—正癸酸；2—十二烷酸；3—十四烷酸；4—十六烷酸；5—棕榈油酸；6—十七烷酸（内标物）；7—十八烷酸；8—油酸；9—亚油酸；10—亚麻酸；11—二十烷酸；12—二十碳四烯酸；13—二十碳五烯酸；14—二十二烷酸；15—芥酸；16—二十二碳四烯酸；17—二十四烷酸；18—二十二碳六烯酸

色谱柱：PEG 20M，25m×0.15mm，d_f=0.25μm

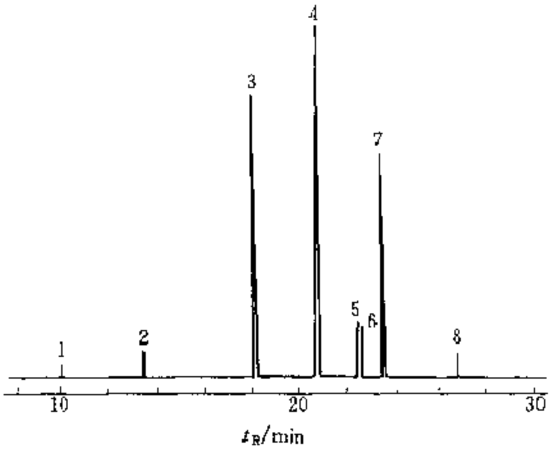
柱　温：140℃ (4min) →200℃ (10min)，15℃·min^{-1}→250℃ (15min)，40℃·min^{-1}

载　气：N_2，2.0ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：250℃



色谱峰：1—十二烷酸；2—十四烷酸；3—十六烷酸；4—十七烷酸；5—亚油酸；6—油酸；7—十八烷酸；8—花生四烯酸

色谱柱：Ultra-2，25m×0.2mm，d_f=0.33μm

柱　温：60℃（2min）→170℃（3min），20℃·min^{-1}→228℃（3min），3℃·min^{-1}

载　气：He

检测器：MS

图 27-71　红细胞膜上磷脂酰乙醇胺的脂肪酸[71]

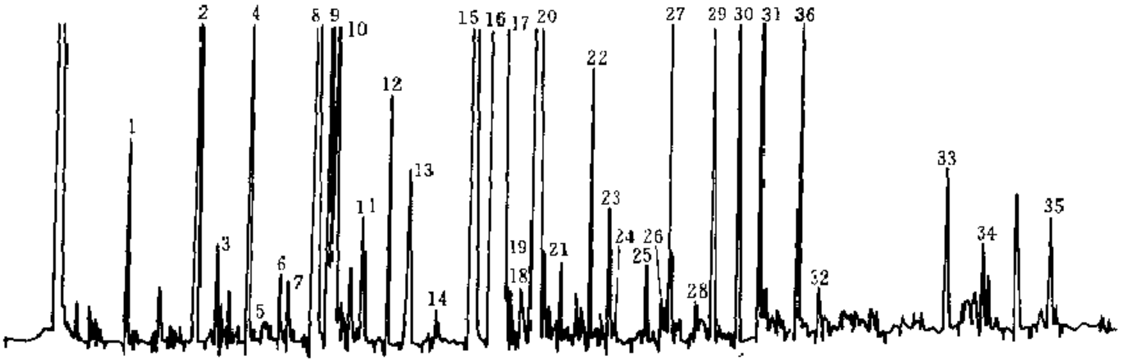


图 27-72　人的脂肪组织中脂肪酸（甲酯衍生物）[72]

色谱峰：1—十二酸；2—十四酸；3—肉豆蔻脑酸；4—十五酸；5—反异十五酸；6—反异十六酸；7—异十六酸；8—十六酸；9—反棕榈油酸；10—顺棕榈油酸；11—反异十七酸；12—十七酸；13—十七碳一烯酸；14—十六碳四烯酸；15—十八酸；16—油酸；17—瓦克苓酸；18—反油酸；19，20，21—十八碳二烯酸；22，23，24—十八碳三烯酸；25—二十酸；26，27—二十碳一烯酸；28—二十二酸；29，30—二十碳三烯酸；31，32—二十碳四烯酸；33—二十二碳四烯酸；34—二十二碳五烯酸；35—二十四酸；36—内标物

色谱柱：Supelco-wax-10，60m×0.25mm，d_f=0.25μm

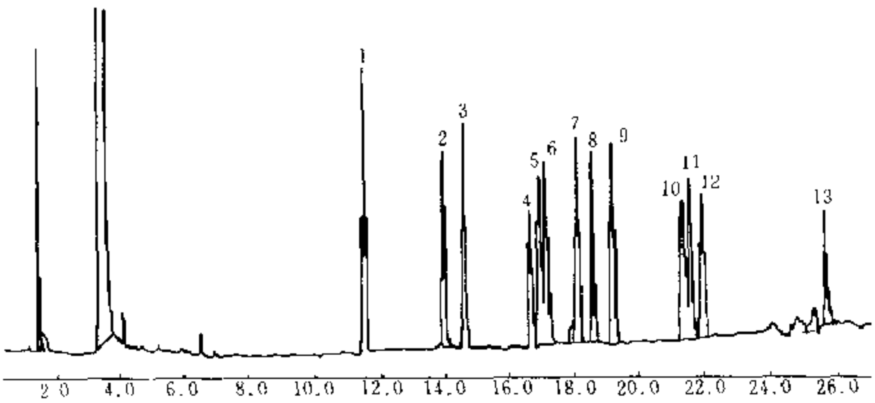
柱　温：200℃（10min）→260℃（30min），2℃·min^{-1}

载　气：He，2ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：275℃

检测器温度：275℃



色谱峰：1—十四烷酸；2—十六烷酸；3—棕榈油酸；4—十八烷酸；5—岩芹酸；6—油酸；7—亚油酸；8—γ-亚麻酸；9—亚麻酸；10—11，14，17-二十碳三烯酸；11—*cis*-5，8，11，14-二十碳四烯酸；12—*cis*-8，11，14-二十碳三烯酸；13—二十二碳六烯酸

图 27-73　磷脂酸中脂肪酸（五氟苄基酯衍生物）[73]

色谱柱：BP×70，25m×0.33mm，d_f=0.25μm

柱　温：85℃（2min）→165℃，40℃·min^{-1}→250℃（1min），3.5℃·min^{-1}

载　气：N_2，48kPa

检测器：ECD

气化室温度：65℃→165℃，150℃·min^{-1}→300℃，50℃·min^{-1}

检测器温度：300℃

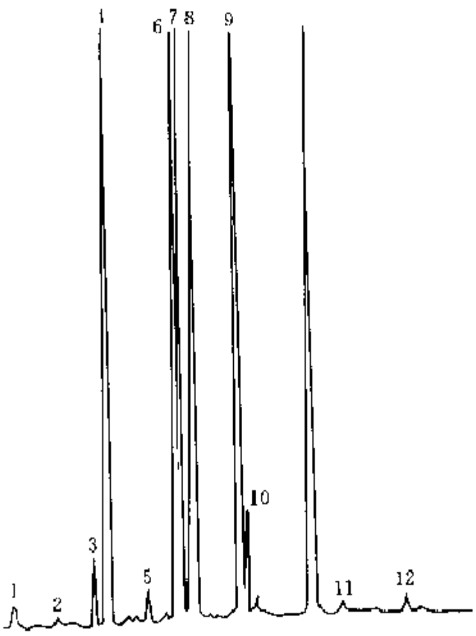


图 27-74 小鼠肝脏脂肪酸（甲酯衍生物）[74]

色谱峰：1—肉豆蔻酸；2—十五烷酸；3—棕榈油酸；4—棕榈酸；5—十七烷酸；6—亚油酸；7—油酸；8—硬脂酸；9—花生四烯酸；10—花生酸；11—山芋酸；12—二十四烷酸

色谱柱：SE 54，12m

柱 温：80℃→250℃，4℃·min⁻¹

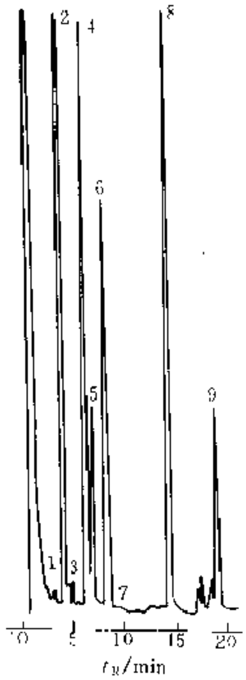


图 27-75 大鼠肝细胞微粒体中脂肪酸（甲酯衍生物）[75]

色谱峰：1—豆蔻酸；2—软脂酸；3—软脂油酸；4—硬脂酸；5—油酸；6—亚油酸；7—γ-亚麻酸；8—花生四烯酸；9—二十二碳六烯酸

色谱柱：10% OV-275，Chromosorb W AW，2.1m×3.2mm

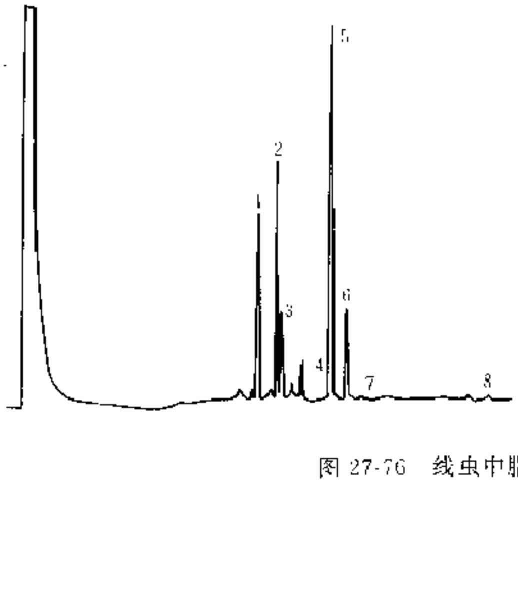
柱 温：180℃（4min）→220℃（8min），8℃·min⁻¹

载 气：N_2

检测器：FID

气化室温度：240℃

检测器温度：240℃



色谱峰：1—正十五酸（内标物）；2—正十六酸；3—十六碳一烯酸；4—正十八酸；5—十八碳一烯酸；6—十八碳二烯酸；7—十八碳三烯酸；8—二十碳四烯酸

色谱柱：FFAP，30m×0.32mm

柱 温：60℃→190℃，10℃·min⁻¹

载 气：N_2

检测器：FID

气化室温度：260℃

检测器温度：260℃

图 27-76 线虫中脂肪酸（甲酯衍生物）[76]

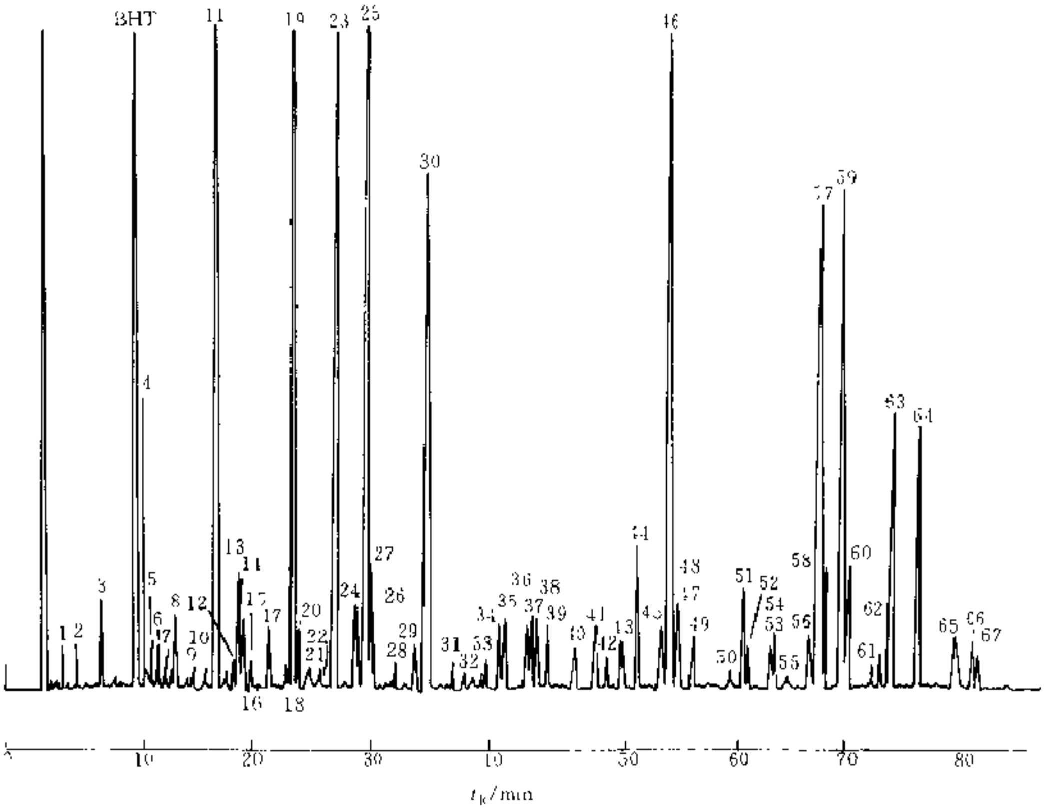
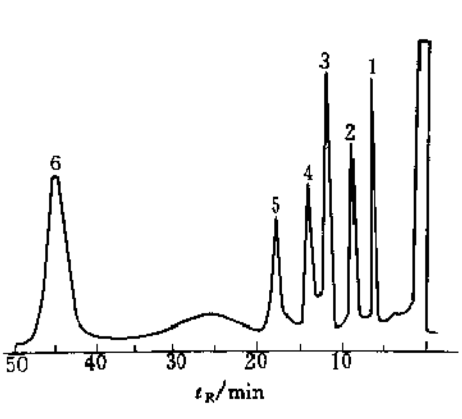


图 27-77　人红细胞磷脂脂肪酸（甲酯衍生物）[77]

色谱峰：1—辛酸；2—癸酸；3—十二酸；4—十四酸；5—未知物；6—反-肉豆蔻脑酸；7—顺-肉豆蔻脑酸；8—十五酸；9—异十八酸+十五碳一烯酸；10—反异十六酸；11—十六酸；12,13—未知物；14—反-棕榈油酸；15—顺棕榈油酸；16—未知物；17—未知物；18—植烷酸；19—反十七碳一烯酸（内标物）；20—顺十七碳一烯酸；21,22—未知物；23—十八酸；24,25,26—十八碳一烯酸；27—未知物；28,30—十八碳二烯酸；29—十九酸；31,32,33—未知物；34—二十酸；35—十八碳三烯酸；36,39,40—未知物；37,38—二十碳一烯酸；41—二十碳二烯酸；42、43—未知物；44—二十碳二烯酸；45—未知物；46—二十碳四烯酸+二十二酸+二十碳三烯酸；47,48—未知物；49—二十二碳一烯酸；50—未知物；51—二十碳五烯酸；52,53,54,55,56—未知物；57—二十二碳三烯酸+二十四酸；58—二十二碳四烯酸；59—二十四碳一烯酸；60,61,62—未知物；63—二十二碳五烯酸；64—二十二碳六烯酸；65,66,67—未知物；BHT—抗氧化剂

色谱柱：SP-2340、30m　　柱　温：100℃→190℃



色谱峰：1—十六烷酸；2—十七烷酸；3—十八烷酸；4—十八碳烯酸；5—十八碳二烯酸；6—廿碳四烯酸

色谱柱：15%聚乙二醇丁二酸酯，Chromosorb W AW DMCS（60目～80目）

柱　温：162℃

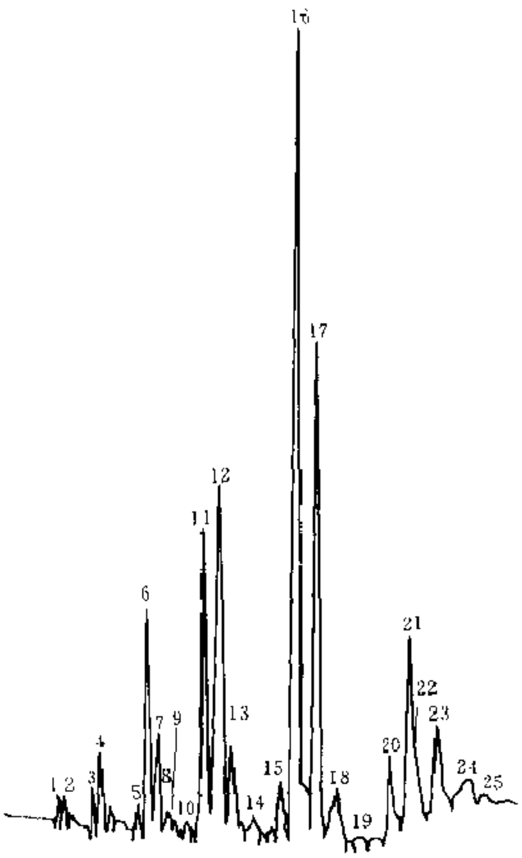
载　气：N_2，25ml・min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：220℃

检测器温度：200℃

图 27-78　家兔视网膜脂质中脂肪酸（甲酯衍生物）[78]



色谱峰❶：1—MMP；2—MMP_n；3—MPP；4—MOM；5—MLM；6—PPP；7—MOP；8—MLP；9—MLP_n；10—PPS；11—POP；12—PLP+PP_nO；13—PLP_n+MLO；14—MLL；15—POS；16—POO；17—PLO；18—PLL；19—SOS；20—SOO；21—OOO；22—SOL；23—OLO；24—OLL；25—LLL

❶脂肪酸酯的符号 M—十四烷酸酯；P—十六烷酸酯；S—十八烷酸酯；P_n—棕榈酸油酯；O—油酸酯；L—亚油酸酯

色谱柱：65%苯基甲基硅氧烷，25m×0.25mm

柱　温：350℃（1min）→360℃（6min），0.5℃·min^{-1}

载　气：He　　　　检测器：FID

气化室温度：360℃　　检测器温度：360℃

图 27-79　人的脂肪组织中甘油三酸酯[79]

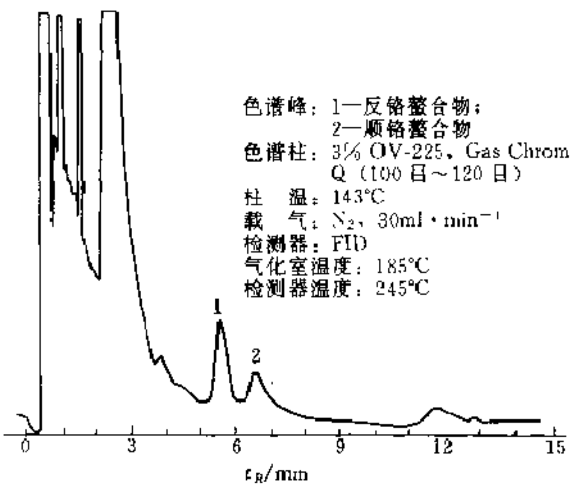


图 27-80　肝中的铬

（三氟乙酰丙酮酸衍生物）[80]

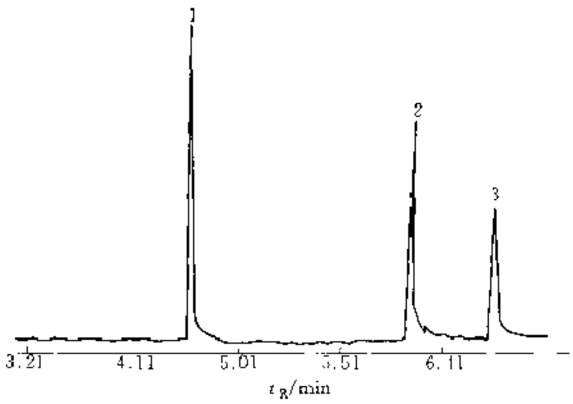


图 27-81　吸烟者头发中尼古丁[82]

色谱峰：1—尼古丁（2.41ng·mg^{-1}）；2—可铁宁（0.59ng·mg^{-1}）；3—氯胺酮（内标物）

色谱柱：BP-5，12m×0.22mm

柱　温：60℃（0.9min）→280℃（1min），30℃·min^{-1}

载　气：He，3.2ml·min^{-1}

检测器：MS

气化室温度：250℃

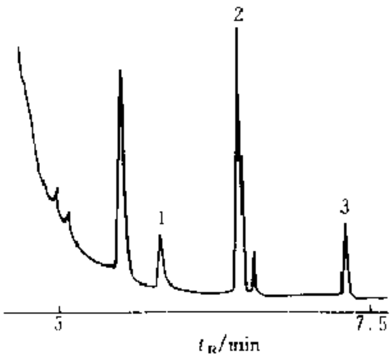


图 27-82　敌百虫中毒死者胃萃取物[81]

色谱峰：1　二甲基亚膦酸酯；2　敌百虫代谢产物 DDVP（分子式为 $[CH_3O]_2PO \cdot O \cdot CHCl_2$）；3　敌百虫
色谱柱：SE-54，30m×0.25mm
柱　温：60℃（1min）→260℃（20min），20℃·min⁻¹
载　气：He
检测器：MS
气化室温度：100℃

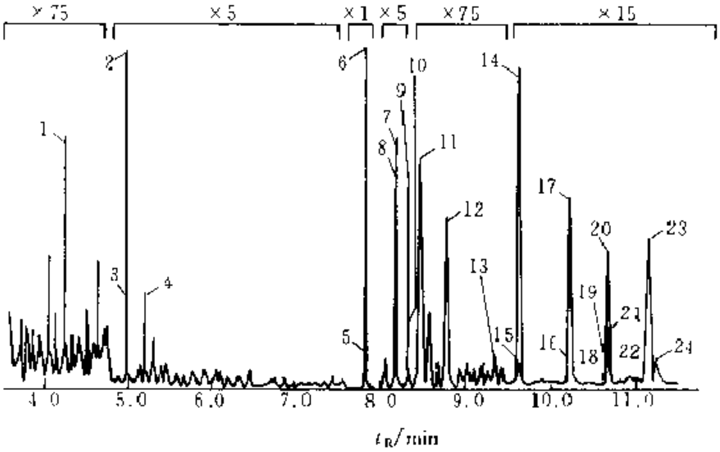


图 27-83　吸海洛因者头发（BSTFA 衍生物）[18]

色谱峰：1　脱水爱康宁甲酯；2—［$^2H_3$］爱康宁甲酯；3—爱康宁甲酯；4—爱康宁乙酯；5—［$^2H_3$］可卡因；6　可卡因；7　［$^2H_3$］乙基苯酰爱康宁；8　乙基苯酰爱康宁；9　［$^2H_3$］苯酰爱康宁；10　苯酰爱康宁；11　去甲可卡因；12　去甲乙基苯酰爱康宁；13　苯酰去甲爱康宁；14　［$^2H_3$］可待因；15　可待因；16　［$^2H_3$］吗啡；17—吗啡；18—去甲可待因；19—［$^2H_6$］-6-乙酰吗啡；20—［$^2H_3$］-6-乙酰吗啡；21　6-乙酰吗啡；22　去甲吗啡；23　［$^2H_3$］海洛因；24—海洛因
色谱柱：HP 1，12m×0.2mm，d_f=0.33μm
柱　温：70℃（1min）→220℃（0.25min），35℃·min⁻¹→250℃（3min），10℃·min⁻¹
载　气：He，1ml·min⁻¹
检测器：MS
气化室温度：250℃

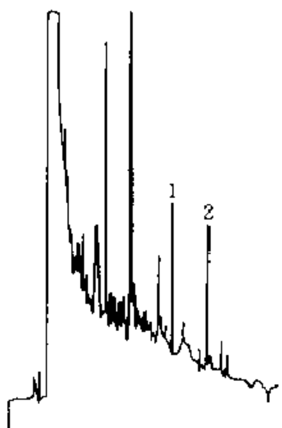


图 27-84　胡蔓藤中毒尸体[84]

色谱峰：1—钩吻碱子；2—钩吻碱甲
色谱柱：甲基硅氧烷，25m×0.32mm，d_f=0.52μm
柱　温：250℃（2min）→290℃（3min），20℃·min⁻¹
载　气：N_2，4ml·min⁻¹
检测器：FID
气化室温度：300℃　　检测器温度：300℃

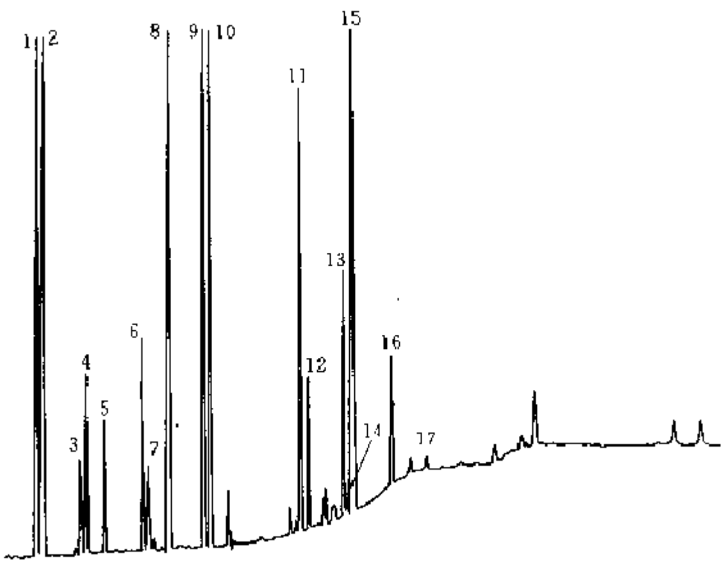
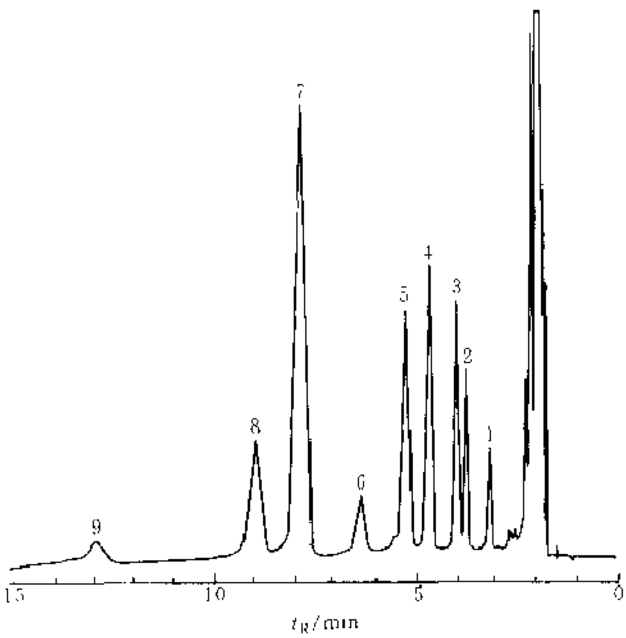


图 27-85　胶原蛋白水解产物（*N*-TFA-Butyl 衍生物）[85]

色谱峰：1—丙氨酸；2—甘氨酸；3—苏氨酸；4—缬氨酸；5—丝氨酸；6—亮氨酸；7—异亮氨酸；8—脯氨酸；9　羟脯氨酸；10　蛋氨酸；11　天门冬氨酸；12—苯丙氨酸；13—赖氨酸；14—酪氨酸；15—谷氨酸；16—精氨酸；17—丝氨酸
色谱柱：DB-1，50m×0.25mm
柱　温：90℃→100℃（3min），10℃·min⁻¹→250℃，10℃·min⁻¹
载　气：He，u=20cm·s⁻¹　　检测器：FID
气化室温度：230℃　　检测器温度：230℃



色谱峰：1—乙酸；2—丙酸；3—异丁酸；4—正丁酸；5—异戊酸；6—正戊酸；7—异己酸；8—正己酸；9—正庚酸

色谱柱：8% SP-1000+1% H_3PO_4，Chromosorb W AW（80目～100目），1.83m×3mm

柱　温：150℃

载　气：N_2，170kPa

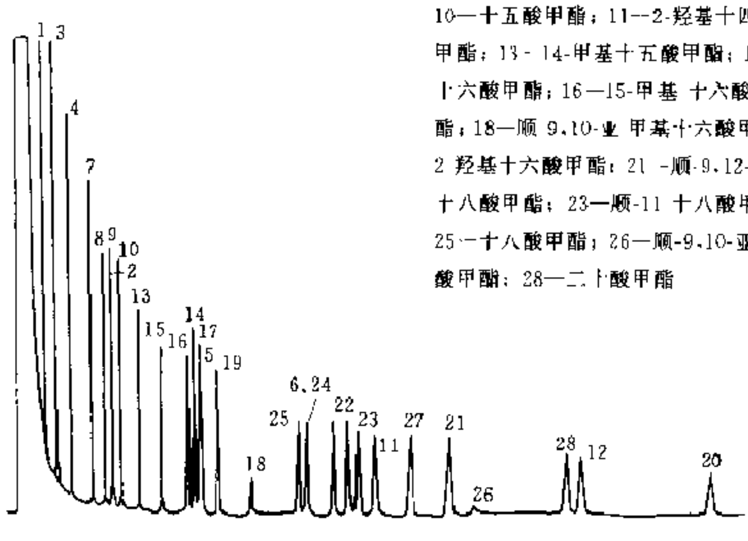
检测器：FID

气化室温度：200℃

检测器温度：200℃

进样方式：顶空法（针150℃；样品90℃）

图 27-86　厌氧菌



色谱峰：

1—十一酸甲酯；2—2-羟基癸酸甲酯；3—十二酸甲酯；4—十三酸甲酯；5—2-羟基十二酸甲酯；6—3-羟基十二酸甲酯；7—十四酸甲酯；8—13-甲基十四酸甲酯；9—12-甲基十四酸甲酯；10—十五酸甲酯；11—2-羟基十四酸甲酯；12—3-羟基十四酸甲酯；13—14-甲基十五酸甲酯；14—顺-9-十六酸甲酯；15—十六酸甲酯；16—15-甲基十六酸甲酯；17—14-甲基十六酸甲酯；18—顺-9,10-亚甲基十六酸甲酯；19—十七酸甲酯；20—2-羟基十六酸甲酯；21—顺-9,12-十八烷二酸甲酯；22—顺-9-十八酸甲酯；23—顺-11-十八酸甲酯；24—反-9-十八酸甲酯；25—十八酸甲酯；26—顺-9,10-亚甲基十八酸甲酯；27—十九酸甲酯；28—二十酸甲酯

图 27-87　细菌细胞壁有机酸（甲酯衍生物）[56]

色谱柱：氰丙基（90%）甲基硅氧烷，50m×0.25m，d_f=0.2μm　　载　气：H_2

柱　温：150℃　　检测器：FID

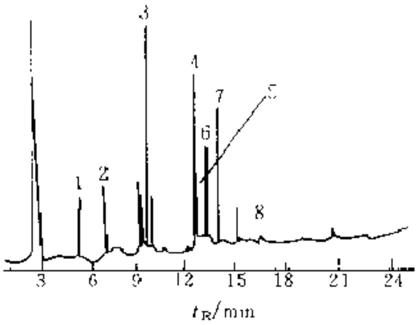


图 27-88 分枝杆菌副偶发（酸性水解酯化液）[87]

色谱峰：1—月桂酸甲酯；2—肉豆蔻酸甲酯；3—棕榈酸甲酯；4—十八碳烯酸甲酯；5—α-十八碳烯酸甲酯；6—硬脂酸甲酯；7—10-甲基结核硬脂酸甲酯；8—花生酸甲酯

色谱柱：OV-101，25m × 0.22mm，d_f = 0.25μm

柱　温：180℃（2min）→240℃（2min），6℃·min^{-1}→280℃（4min），6℃·min^{-1}

载　气：N_2　　气化室温度：280℃

检测器：FID　检测器温度：300℃

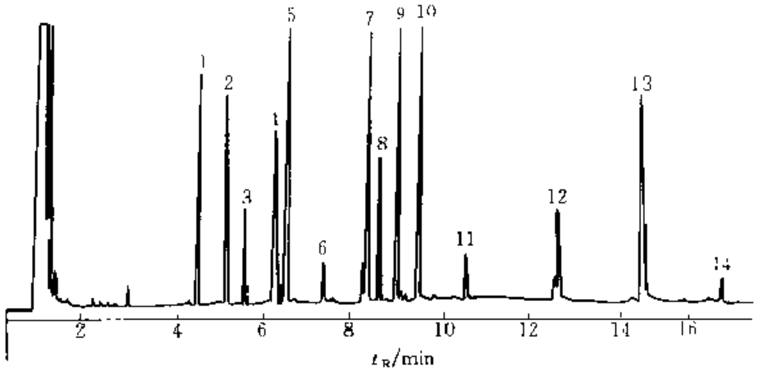


图 27-90 分枝杆菌培养物中脂肪酸（甲酯衍生物）[illegible]

色谱峰：1—十四烷酸；2—2,4-二甲基十四烷酸；3—十五烷酸；4—十六烯酸；5—十六烷酸；6—2-十八醇；7—十八烯酸；8—十八烷酸；9—10-甲基十八烷酸；10—2-二十醇；11—二十烷酸；12—二十二烷酸；13—二十四烷酸；14—二十六烷酸

色谱柱：SPB-1，15m×0.25mm，d_f=1μm

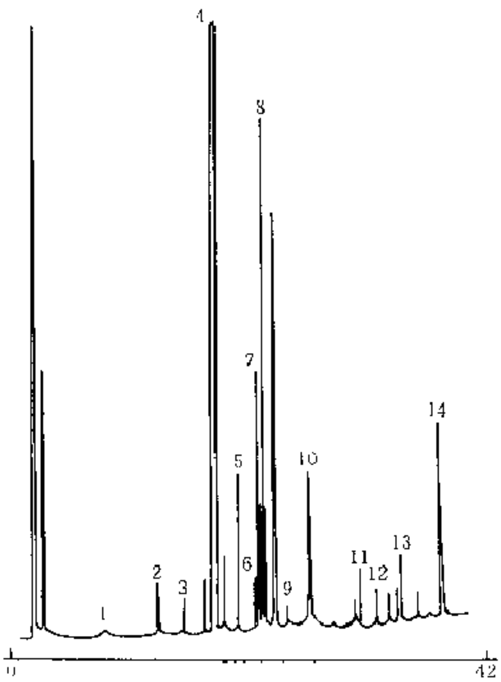
柱　温：175℃→300℃（15min），8℃·min^{-1}

载　气：He，1ml·min^{-1}（175℃）

检测器：FID

气化室温度：275℃

检测器温度：315℃



色谱峰：1—十二酸甲酯；2—十四酸甲酯；3—十五酸甲酯；4—十六酸甲酯；5—十七酸甲酯；6—亚油酸甲酯；7—油酸甲酯；8—十八酸甲酯；9—十九酸甲酯；10—二十酸甲酯；11—二十二酸甲酯；12—二十三酸甲酯；13—二十四酸甲酯；14—二十六酸甲酯

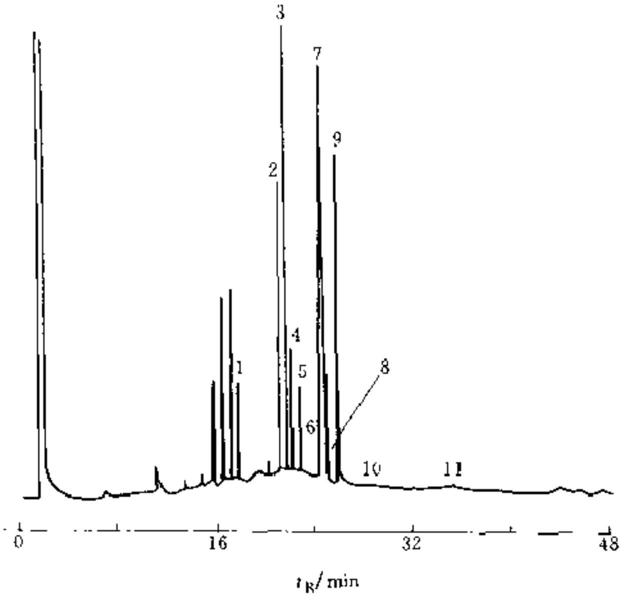
色谱柱：OV-1701，14m×0.23mm

柱　温：120℃（1min）→280℃，4℃·min^{-1}

气化室温度：260℃

检测器温度：250℃

图 27-89 结核分枝杆菌脂肪酸（甲酯衍生物）[88]



色谱峰：1—十四酸甲酯；2—十六烯-2-酸甲酯；3—十六烯-1-酸甲酯；4—十六酸甲酯；5—未知物；6—十八烯-2-酸甲酯；7—十八烯-1-酸甲酯；8—十八酸甲酯；9—10-甲基十八烷酸；10—二十酸甲酯；11—二十二酸甲酯

色谱柱：OV-1，25m×0.25mm

柱　温：120℃（2min）→260℃（25min），6℃·min⁻¹

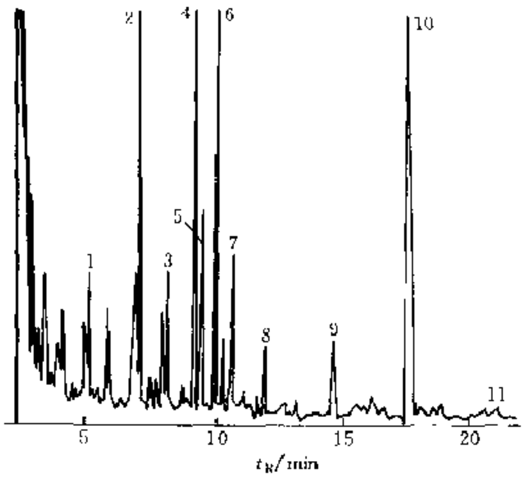
载　气：N_2，$\bar{u}$=31.7cm·s⁻¹

检测器：FID

气化室温度：270℃

检测器温度：280℃

图 27-91　偶发分枝杆菌细胞脂肪酸（甲酯衍生物）[90]



色谱峰：1—正十四酸甲酯；2—正十六酸甲酯；3—正十七酸甲酯；4—十八碳一烯酸甲酯；5—正十八酸甲酯；6—10-甲基结核十八酸甲酯；7—正十九酸甲酯；8—正二十酸甲酯；9—正二十二酸甲酯；10—正二十四酸甲酯；11—正二十六酸甲酯

色谱柱：OV-1，25m 空心柱

柱　温：170℃→250℃，15℃·min⁻¹→280℃（10min），3℃·min⁻¹

载　气：N_2

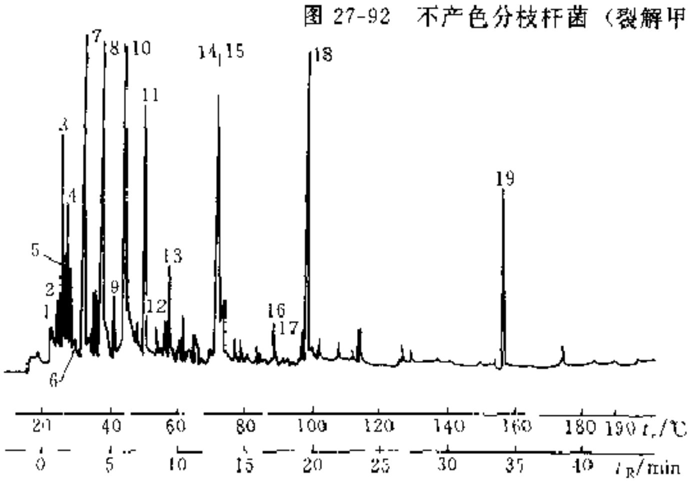
检测器：FID

气化室温度：280℃

检测器温度：250℃

裂解条件：裂解温度770℃，20s

图 27-92　不产色分枝杆菌（裂解甲基化）[91]



色谱峰：1—丙酮；2—2-丁酮；3—丙酸甲酯；4—甲基丁醇；5—硫赶乙酸甲酯；6—异硫代氰酸甲酯；7—异丁酸甲酯；8—二甲基二硫化物；9—甲苯；10—丁酸甲基2-甲酯；11—乙酸正丁酯；12—戊乙烯酸甲酯；13—二甲苯；14—苯甲醛；15—二甲基三硫化物；16—苯甲酸甲酯；17—壬酮-2；18—十一碳烯；19—4-甲基-2,6-二叔丁基苯酚

色谱柱：SF-96，80m×0.28mm

柱　温：20℃→190℃，4℃·min⁻¹

图 27-93　氧化的臭瑞赛拉细菌挥发物[92]

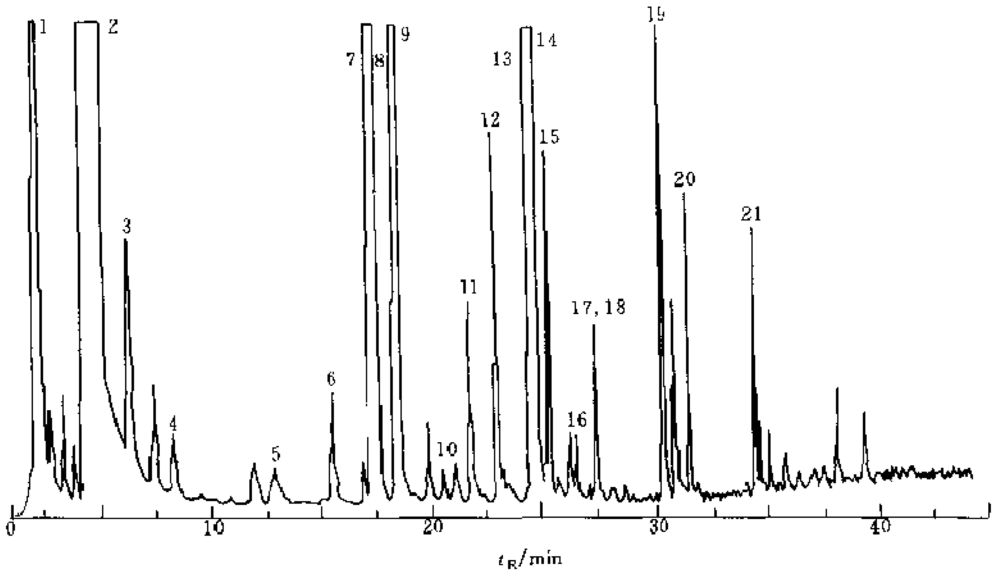


图 27-94　真菌培养时产生的挥发物[93]

色谱峰：1—乙醛；2—乙醇；3—丙酮；4—甲酸乙酯；5—1 丙醇；6—2 丁酮；7—乙酸乙酯；8—氯仿；9—异丁醇；10 苯；11—2 戊酮；12——溴二氯甲烷；13—3-甲基 1 丁醇；14—2 甲基-1-丁醇；15—二甲基二硫化物；16—甲苯；17 二溴 -氯甲烷；18—丁酸甲酯；19—乙酸异戊酯；20 双环(2.4.0) 八-1.3.5 三烯；21—2.5.4 壬二醛

色谱柱：RSL 160，25m×0.32mm，d_f=5.0μm

柱　温：40°C (5min) →200°C，10°C・min^{-1}

载　气：He，1ml・min^{-1}

检测器：MS

气化室温度：250°C

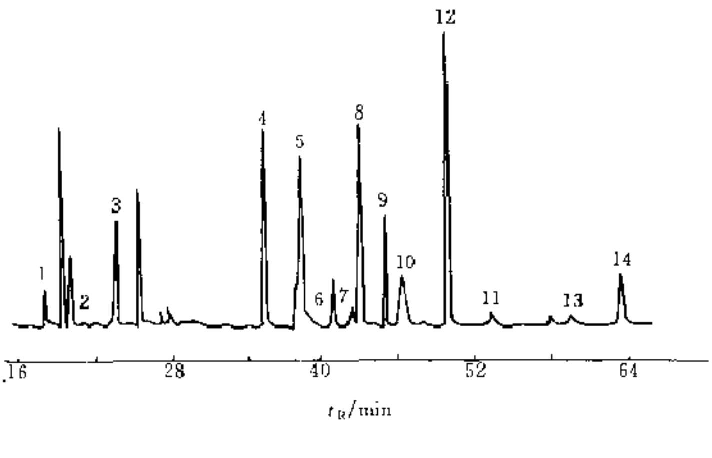


图 27-95　临床结核分枝杆菌单糖（硅烷衍生物）[94]

色谱峰：1—阿拉伯糖；2—核糖；3—鼠李糖；4—甘露糖；5,6 果糖；7,8—半乳糖；9，10，11—葡萄糖；12—甘露醇(内标)；13—N-乙酰-D-半乳糖胺；14—肌醇

色谱柱：SE 33，28m×0.24mm

柱　温：150°C →171°C，2°C・min^{-1}→250°C，1°C・min^{-1}

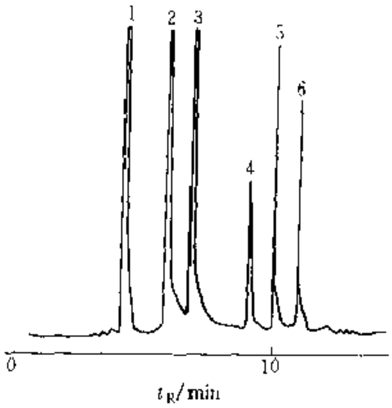


图 27-96　细菌培养中的硒化物[95]

色谱峰：1—CH_3SH；2—$(CH_3)_2S$；3—$(CH_3)_2Se$；4—$(CH_3)_2S_2$；5—$(CH_3)_2SeS$；6—$(CH_3)_2Se_2$

色谱柱：DB 5，30m×0.25mm，d_f=1μm

柱　温：−20℃（1min）→300℃（5min），20℃·min⁻¹

载　气：He

检测器：硫化学发光检测器（SCD 300 型）

进样方式：顶空法

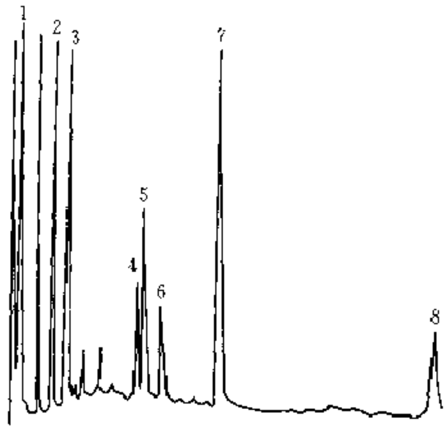


图 27-97　镰刀菌毒素[96]

色谱峰：1—雪腐镰刀菌烯醇；2—脱氧雪腐镰刀菌烯醇；3—镰刀菌烯酮-X；4—新茄病镰刀菌烯醇；5—二乙酰藨草镰刀菌烯醇；6—玉米赤霉烯；7—HT-2 毒素；8—T-2 毒素

色谱柱：SE-54，22m×0.3mm

柱　温：210℃→220℃（40min），2℃·min⁻¹

载　气：N_2　　检测器：ECD

气化室温度：300℃　　检测器温度：300℃

参　考　文　献

1　Korn M，Wodarz R，Drysch K，et al. HRC，1988；11：313

2　Weber L. J Chromatogr，1992；571：349

3　Veningerova M，Prachar V，Uhnak J，et al. J Chromatogr B，1994；657：103

4　常理文，余兆楼，王维通等. 色谱，1990；8：12

5　Tucman M，Bowers L D，Fregien K D，et al. J Chrom Sci，1984；22：198

6　Meier-Augenstein W，Jones J L，Nyhan W L，et al. J Chromatogr，1993；615：127

7　Mardens Y，Kumps A，Planchon C，et al. J Chromatogr，1992；577：341

8　Liebich H M，Wahl G. HRC，1989；12：608

9　Liebich H M，Pickert A，Stierle V，et al. J Chromatogr Biomed Appl，1980；199：181

10　Szymanski H A. Biomedical Application of Gas Chromatography. v2. New York：Plenum Press，1968：82

11　Mares P，Rezanka T，Novak M. J Chromatogr，1991；568：1

12　万宏，董运宁，梅家荷等. 分析测试通报，1990；9（2）：13

13　Reunanen M，Kroneld R. J Chrom Sci，1982；20：449

14　焦海□，戴□鸣. 色谱，1991；9：387

15　Moodie I M，Houg B J，Labadarios D. HRC，1989；12：437

16　Woo K L，Lee D S. J Chromatogr B，1995；665：15

17　Kovarich E，Munari F. HRC&CC，1982；5：175

18　Horning E C，Horning M G，Szafranek J，et al. J Chromatogr，1974；91：367

19　Pfaffenberger C D，Horning E C. Anal Biochem，1977；80：329

20　Cartoni G P，Ciardi M，Giarrusso A，et al. HRC，1988；11：528

21　Lin Feng，Hu Xuying，Luo Yi. J Chromatogr B，1991；658：375

22　Giovanni N D，Rossi S S. J Chromatogr B，1994；658：69

23 吴筠，崔凯荣，王彬等. 分析测试学报，1994；13（3）：71
24 Kinberger B，Holmen A，Wahrgren P. J Chromatogr，1981；207：148
25 雷秀敏，刘锋，罗毅. 色谱，1994；12：53
26 徐友宣，徐妍青，方洪钜. 分析化学，1991；19：751
27 叶磊，张长久，张亦中. 分析化学，1995；23：32
28 Daumas L，Sabot J-F，Vermanlen E，et al. J Chromatogr，1991；570：89
29 Ohbira S，Matsui H. J Chromatogr，1993；622：173
30 Alltech. Chromatography Catalog 350，1995：94
31 Houze P，Chaussard J，Harry P，et al. J Chromatogr，1993；619：251
32 Murase M，Kimura Y，Nagata Y. J Chromatogr B，1995；664：415
33 Caruso U，Fowler B，Ercelg M，et al. J Chromatogr，1991；562：147
34 Liebich H M，Pickert A，Tetschner B. J Chromatogr，1984；289：259
35 Husek P. J Chromatogr B，1995；669：352
36 张铁恒，徐蓓，陈维杰. 分析测试通报，1988；7（3）：1
37 Labadarios D，Moodie I M，Burger J A，et al. HRC，1998；11：229
38 Bruckner H，Hausch M. J Chromatogr，1993；614：7
39 Kataoka H，Takagi K，Makita M. J Chromatogra B，1995；664：421
40 Zee T，Stellaard F，Jakobs C. J Chromatogr，1996；574：335
41 常理文，张纾峰，薛启寅，第二届全国生物医药学色谱学术会议论文集，1990：396
42 邱丰和，崔珂，罗毅等. 色谱，1996；14：264
43 刘锋，胡绪英，李前远，分析测试学报，1993；12（1）：26
44 Lantg R J，Farid K Z，Koons J，et al. J Chromatogr，1993；614：175
45 Jourdil N，Pinteur B，Vincent F，et al. J Chromatogr，1993；613：59
46 谭炳炎，郑文晖，汤丽芬等. 色谱，1996；14：473
47 胡永狮，杨蓉菁. 色谱，1992；10：287
48 Giachetti C，Assandri A，Zanolo G，et al. Chromatographia，1994；39：162
49 Giachetti C，Poletti P，Zanolo G. HRC，1988；11：525
50 Hattori H，Yamamoto S，Iwata M，et al. J Chromatogr，1992；581：213
51 Phillip A M，Logan B K，Stafford D T. HRC，1990；13：754
52 Han C，Gumbleton M，Lau D T W，et al. J Chromatogr，1992；579：237
53 Gremeau I，Sautou V，Pinon V，et al. J Chromatogr B，1995；665：399
54 王原，于东海，王志刚等. 色谱，1996；14：475
55 Kinberger B，Holmen A，Wahrgren P. J Chromatogr Biomed Appl，1981；224：449
56 Volmut J，Melnik M，Matlsova E. HRC，1993：16：27
57 Okeke C C，Wynn J E，Patrich K S. Chromatographia，1994；38：52
58 Hattori H，Yamamoto S，Iwata M，et al. J Chromatogr，1992；579：247
59 胡绪英，刘锋，罗毅. 第九次全国色谱学术报告会文集，1993：329
60 王集民，陈建思，林展江等. 分析测试通报，1978；6（5）：32
61 冯建林，罗毅. 第九次全国色谱学术报告会文集，1993：507
62 何平，殷恭宽. 色谱，1987：5：111
63 Kim K R，Hahn M K，Zlatkis A，et al. J Chromatogr，1989；468：289
64 万卫华，李汉令. 第五次全国色谱学术报告会文集，1985：300
65 李昕权，陈桂莲，高嵩等. 色谱，1992；10：248
66 Labadarios D，Moodie I M，Hough B J，et al. HRC，1989；12：234
67 余兆楼，常理文，徐桂云等. 分析化学，1991；19：11
68 Karlaganis G，Paumgartner G. J Lipid Res，1978；19：771
69 Chrompack News，1986；13（2）：8

70 章满，胡曼玲，唐茂云等. 色谱，1995；13：415
71 李楠，唐云，顾倬云. 色谱，1996；14：251
72 Ruiy-Gutierrey V，J Chromatogr，1992；581：17!
73 Major C，Wolf B A，J Chromatogr B，1994；658：233
74 胥照平，周方，陈立茵等. 色谱，1991；9：382
75 满洪升，刘晓芳，仲来福等. 色谱，1993，11，287
76 郑文晖，谭丙炎，汤丽芬. 色谱，1996，14，53
77 Heckers H，Melcher F W，Schloeder U. J Chromatogr，1977：136：311
78 许自超，李晓晔，李蕴秀等. 第八次全国色谱学术报告会文集，1991：220
79 Ruiz Gutierrez V. J Chromatogr，1992；581：171
80 Fishbein L. Chromatography of Environmental Harzards. v2. New York：Elsevier Sci，1973：23
81 李玉兰，何毅，徐婉. 分析测试通报，1992；11（4）：14
82 Kintz P. J Chromatogr，1992；580：347
83 Wang W-L，Darwin W D，Cone E J. J Chromatogr B，1994；660：279
84 陈鸿义，陈小华，王格琛等. 色谱，1990；8：383
85 师治贤，张金霞，陈耀祖等. 分析测试通报，1990；9（1）：52
86 Vannieuwenhuyze F，Sandra P. Chromatographia，1987；23：850
87 敦惠娟，邓长元，瞿秉洋. 分析化学，1996；24：1052
88 曾昭睿，吴采樱，韩惠敏等. 色谱，1990；8：163
89 Garcia-Barcelh M，Luquin M，Belda F，et al. J Chromatogr，1993；617：299
90 康建，马小锋，包美复等. 色谱，1995；13：269
91 张寅，庄玉辉. 色谱，1995；13：411
92 Lee M L，Smith D L，Freeman L R. Appl Environ Microbiol，1979；37：85
93 Cailleux A，Bouchara J P，Daniel V，et al. Chromatographia，1992；34：613
94 吴采樱，曾昭睿. 现代毛细管柱气相色谱法. 武汉：武汉大学出版社，1990：307
95 Chastteen T G，Silver G M，Birk J W，et al. Chromatographia，1990；30：181
96 罗毅，郑集声，杨进生. 环境化学，1989；8（6）：27

（李浩春　李全洪）

第二十八章　医药类物质色谱图

第一节　西药类物质色谱图

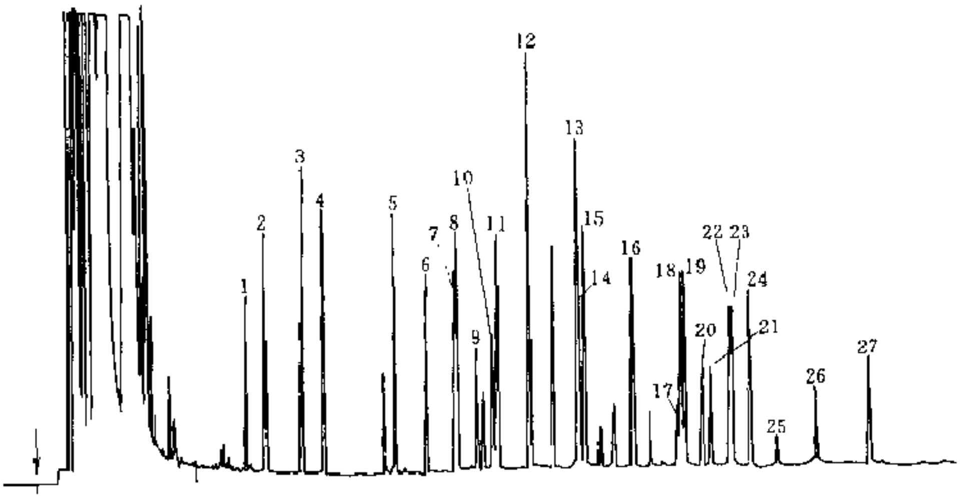


图 28-1　有机酸类药物（TMS 衍生物）

色谱峰：1—苯甲酸；2—苯乙酸；3—2-甲基苯甲酸；4—苯丙酸；5—2-甲氧基苯甲酸；6—2-甲氧基苯乙酸；7—3-甲氧基苯乙酸；8—4-甲氧基苯乙酸；9—反肉桂酸；10—苯乙醇酸；11—高藜芦酸；12—2-甲氧基肉桂酸；13—3-羟基苯乙酸；14—2-甲氧基苯乙醇酸；15—3-羟基苯甲酸；16—4-甲氧基肉桂酸；17—4-羟基苯乙酸；18—4-羟基苯甲酸；19—高香草酸；20—香草酸；21—龙胆酸；22—β-二羟基苯酸；23—4-羟基-3-甲氧基苯乙醇酸；24—香草苯乙醇酸；25—原儿茶酸；26—3,4-二羟基二氢化肉桂酸；27—香草乙酸

色谱柱：CP-Sil5，25m×0.22mm

柱　温：30℃→100℃，40℃·min^{-1}→210℃，4℃·min^{-1}

载　气：He，130kPa

检测器：FID

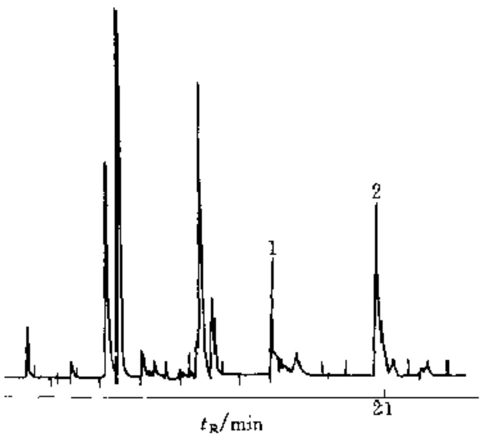


图 28-2　高血脂症药[1]

色谱峰：1—二十碳五烯酸乙酯；2—二十二碳六烯酸乙酯

色谱柱：OV-101，25m×0.32mm

柱　温：150℃→250℃，5℃·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：250℃

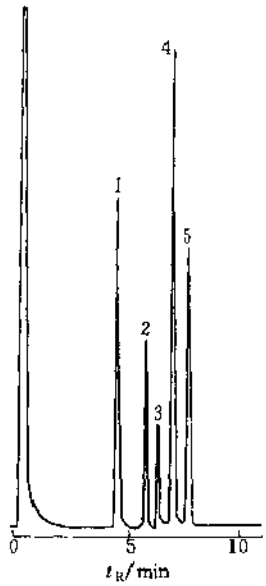


图 28-3　肝炎药[2]

色谱峰：1—苯二甲酸二辛酯（内标物）；2—β-联苯双酯；3—γ-联苯双酯；4—α-联苯双酯；5—三十一烷

色谱柱：3% Dexsil 300，Chromosorb W AW（100 目～120 目），1m×3mm

柱　温：200℃→270℃（5min），10℃·min^{-1}

载　气：N_2　　检测器：FID

气化室温度：260℃　　检测器温度：310℃

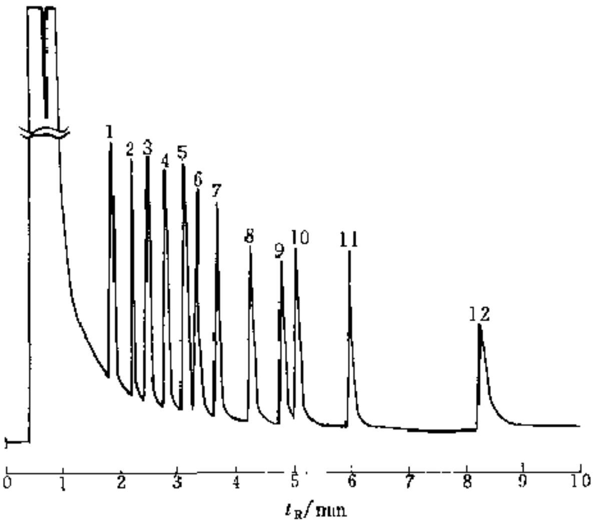


图 28-4　巴比妥类药（一）[3]

色谱峰：1—巴比妥；2—丙巴比妥；3—烯丙异丙巴比妥；4—仲巴比妥；5—异戊巴比妥；6—戊巴比妥；7—司可巴比妥；8—己巴比妥；9—导眠能；10—苯巴比妥；11—庚巴比妥；12—苯妥英

色谱柱：3% OV-1，Gas Chrom Q（100 目～120 目），2m×3mm

柱　温：120℃→220℃，10℃・min^{-1}

载　气：He，30ml・min^{-1}

检测器：FID

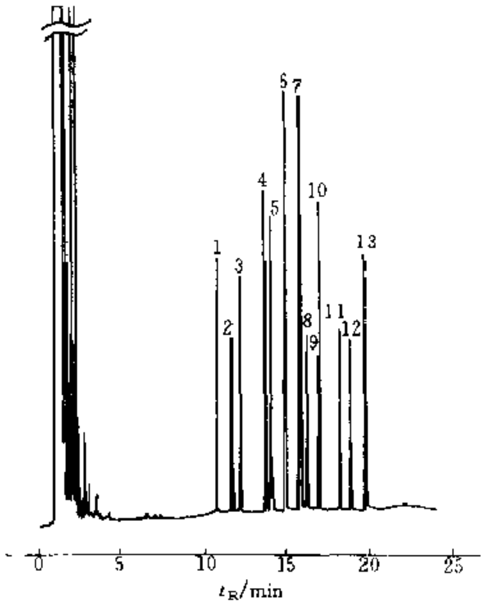


图 28-5　巴比妥类药（二）[4]

色谱峰：1—甲基巴比妥；2—巴比妥；3—卡波麻；4—烯丙异丙巴比妥；5—二烯丙巴比妥；6—异丁巴比妥；7—异戊巴比妥；8—戊巴比妥；9—甲己炔巴比妥；10—司可巴比妥；11—环己巴比妥；12—甲基苯巴比妥；13—苯巴比妥

色谱柱：BPI，25m×0.32mm，d_f=0.5μm

柱　温：90℃→240℃（5min），8℃・min^{-1}

检测器：FID

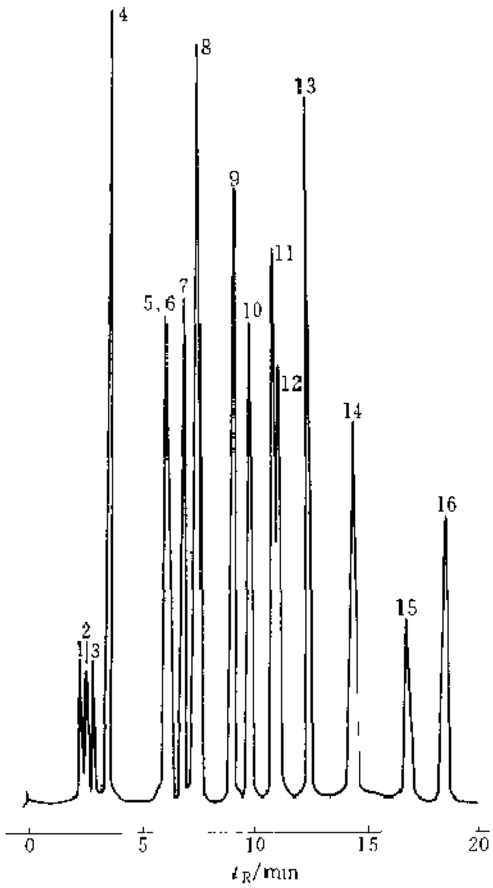


图 28-6　巴比妥类药（三）[5]

色谱峰：1—异丁巴比妥；2—正丁巴比妥；3—戊巴比妥；4—司可巴比妥；5—苯环辛胺；6—氯苯氧胺；7—阿米替林；8—氨苯甲异喹；9—麦普替林；10—安定；11—氯喹；12—去甲安定；13—氟茴哌丁酮；14—奎尼丁；15—哌甲氧嗪；16—内标物

色谱柱：3% OV 17，Chromosorb（100 目～120 目），2m×6mm

柱　温：170℃→290℃，4℃・min^{-1}

载　气：He，30ml・min^{-1}

检测器：FID

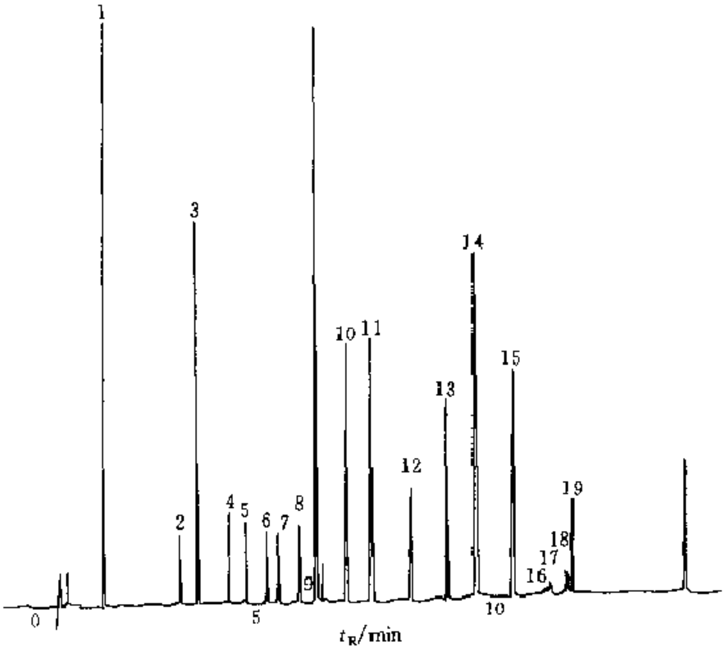
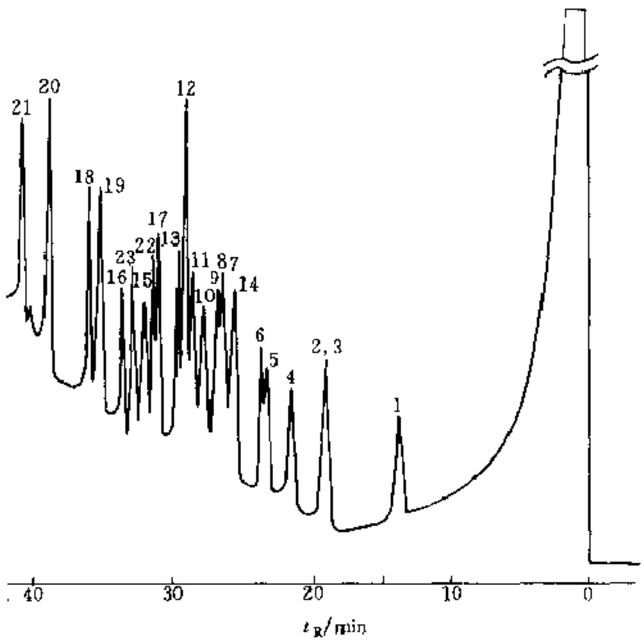


图 28-7 巴比妥类药（四）[7]

色谱峰：1—乙琥胺；2—巴比妥；3—甲哌丁酮（?）；4—烯丙异丙巴比妥；5—叔丁巴比妥；6—异戊巴比妥；7—正戊巴比妥；8—司可巴比妥；9—安宁；10—甲基苯巴比妥；11—苯巴比妥；12—对甲基苯基巴比妥；13—安眠酮；14—扑痫酮；15—苯妥英；16—安定；17—N-去烷基氟胺安定；18—N-去甲基安定；19—利眠宁分解产物

色谱柱：DB-5，15m×0.25mm　　载　气：He，1.0ml·min⁻¹　　气化室温度：250℃

柱　温：130℃⟶290℃，12.8℃·min⁻¹　　检测器：FID　　检测器温度：300℃



色谱峰：

1—巴比妥；2—丙巴比妥；3—双烯丙巴比妥；4—烯丙异丙巴比妥；5—异丁烯丙巴比妥；6—正丁巴比妥；7—异戊巴比妥；8—烯丙新戊巴比妥；9—乙烯另戊巴比妥；10—戊巴比妥；11—另戊烯巴比妥；12—烯丙羟丙巴比妥；13—烯丙戊巴比妥；14—甲乙炔巴比妥；15—溴双烯丙巴比妥；16—环己巴比妥；17—甲基苯巴比妥；18—苯巴比妥；19—环已烯基乙基巴比妥；20—庚巴比妥；21—双环辛巴比妥；22—甲基苯巴比妥；23—烯丙环戊烯巴比妥

图 28-8 二正丙基巴比妥类药[6]

色谱柱：1.82%Dexsil 300，Gas-Chrom Q，2.50m×0.3mm　　柱　温：140℃（15min），4℃·min⁻¹

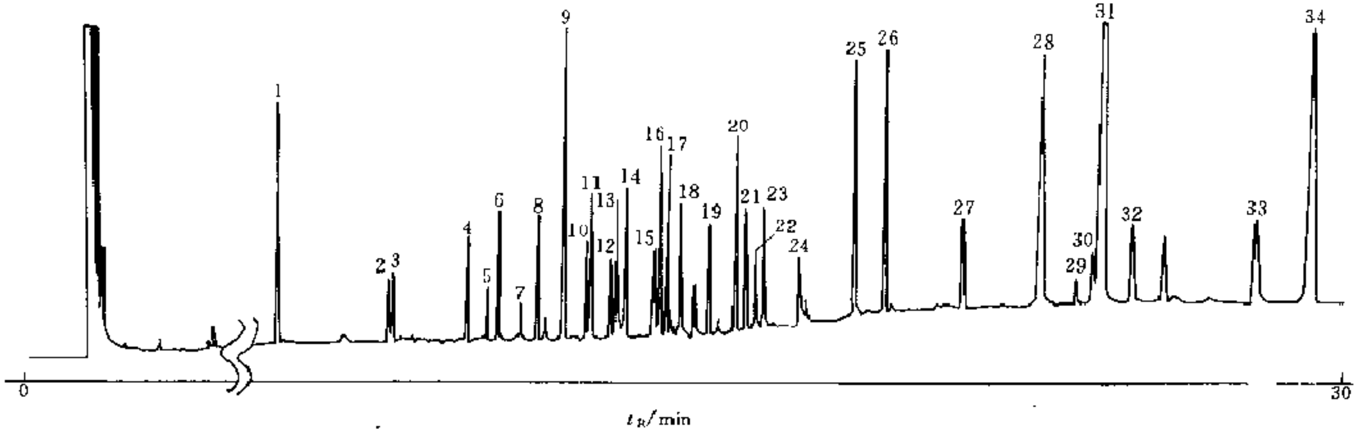


图 28-9 镇静药（一）[9]

色谱峰：1—尼古丁；2—苯甲吗啉；3—异丁苯丙酸；4—普鲁卡因；5—二烯丙巴比妥；6—烯丙异丙巴比妥；7—叔丁巴比妥；8—司可巴比妥；9—戊巴比妥；10—非那西丁；11—异戊巴比妥；12—苄甲苯丙胺；13—扑热息痛；14—羟基丁氨酯；15—苯苯醇胺；16—安宁；17—胃复康；18—环己巴比妥；19—苯吡甲醇胺；20—咖啡因；21—氯苯热明；22—噻吡二胺；23—异噻吡二胺；24—苯巴比妥；25—溴苯热明；26—氯环嗪；27—可卡因；28—吡咯丁胺；29—可待因；30—安定；31—吗啡；32—二氢可待因酮；33—羟氢吗啡酮；34—海洛因

色谱柱：DB-17，30m×0.25mm，d_f=0.25μm　　检测器：FID

柱　温：80℃(1min)→280℃(9min)，10℃·min^{-1}　　气化室温度：250℃

载　气：H_2，41cm·s^{-1}　　检测器温度：300℃

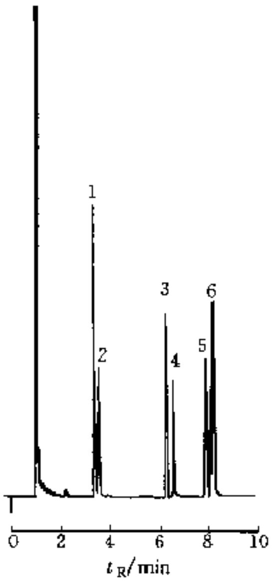


图 28-10 镇静药（二）[14]

色谱峰：1—二烯丙巴比妥；2—烯丙异丙巴比妥；3—苯海拉明；4—甲基苯巴比妥；5—麦沙非林；6—氯苯吡胺
色谱柱：BPI，25m×0.53mm，d_f—1.0μm
柱　温：180℃→250℃（3min），10℃·min^{-1}
检测器：FID

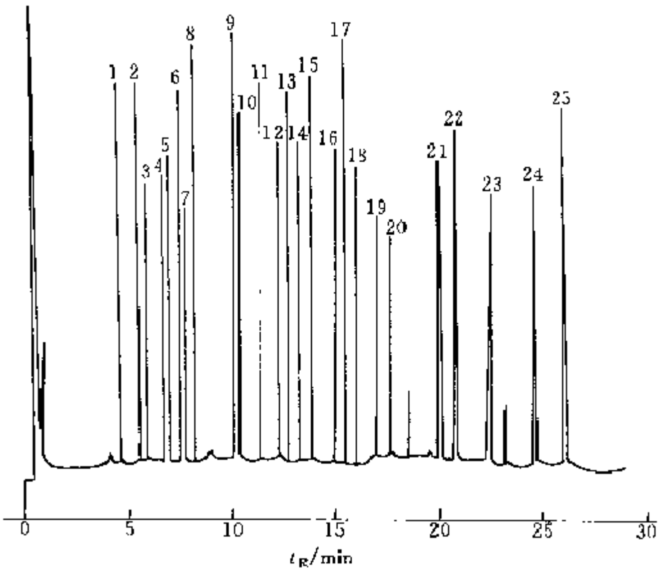


图 28-11 镇静药（三）[8]

色谱峰：1—巴比妥；2—二丙烯巴比妥；3—阿普巴比妥；4—异戊巴比妥；5—戊巴比妥；6—司可巴比妥；7—眠尔通；8—导眠能；9—苯巴比妥；10—环巴比妥；11—美道明；12—安眠酮；13—丙咪嗪；14—异丙嗪；15—丙基解痉素（内标）；16—舒宁；17—安定；18—氯丙嗪；19—3羟基安定；20—三氟拉嗪；21—氟安定；22—硝基安定；23—利眠宁；24—三唑安定；25—佳静安定
色谱柱：SE-54，22m×0.24mm
柱　温：120℃→250℃（15min），10℃·min^{-1}
载　气：H_2　　检测器：FID
气化室温度：280℃　　检测器温度：280℃

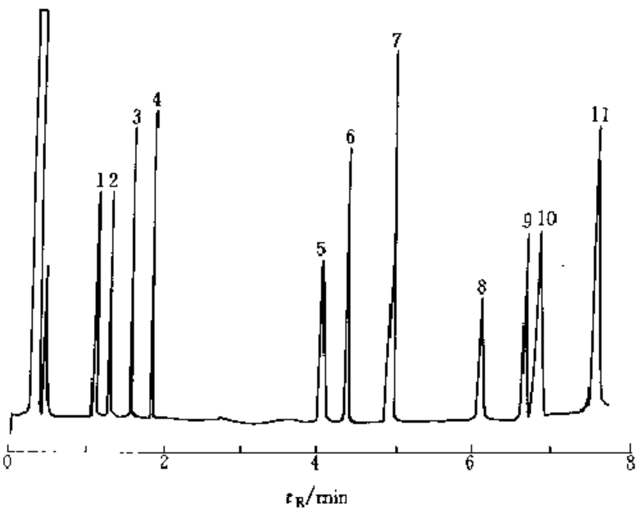


图 28-12 抗癫痫药（一）[10]

色谱峰：1—丙戊酸；2—辛酸；3—乙琥胺；4—甲基丙基琥珀酰亚胺；5—苯基乙基丙二酰胺；6—苯巴比妥；7—对甲基苯巴比妥；8—扑痫酮；9—卡巴咪嗪；10—苯妥英；11—对甲基苯妥英
色谱柱：HP 5，25m×0.31mm，d_f=0.52μm
柱　温：90℃→200℃，40℃·min^{-1}→250℃，10℃·min^{-1}
载　气：H_2　　检测器温度：300℃
检测器：FID　　进样方式：柱上进样
气化室温度：90℃

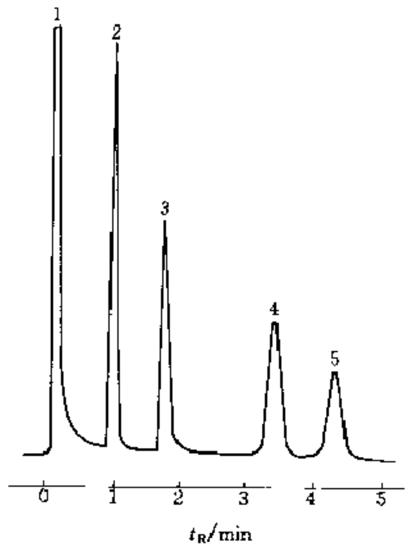


图 28-13 抗癫痫药（二）[11]

色谱峰：1—甲醇；2—丙戊酸；3—环己烷羧酸；4—α，α-二甲基-β-甲基琥珀酰亚胺；5—乙琥胺
色谱柱：10% SP-1000，Supelcoport（80目～100目），0.92m×2mm
柱　温：190℃
载　气：He，40ml·min^{-1}
检测器：FID
气化室温度：200℃
检测器温度：250℃

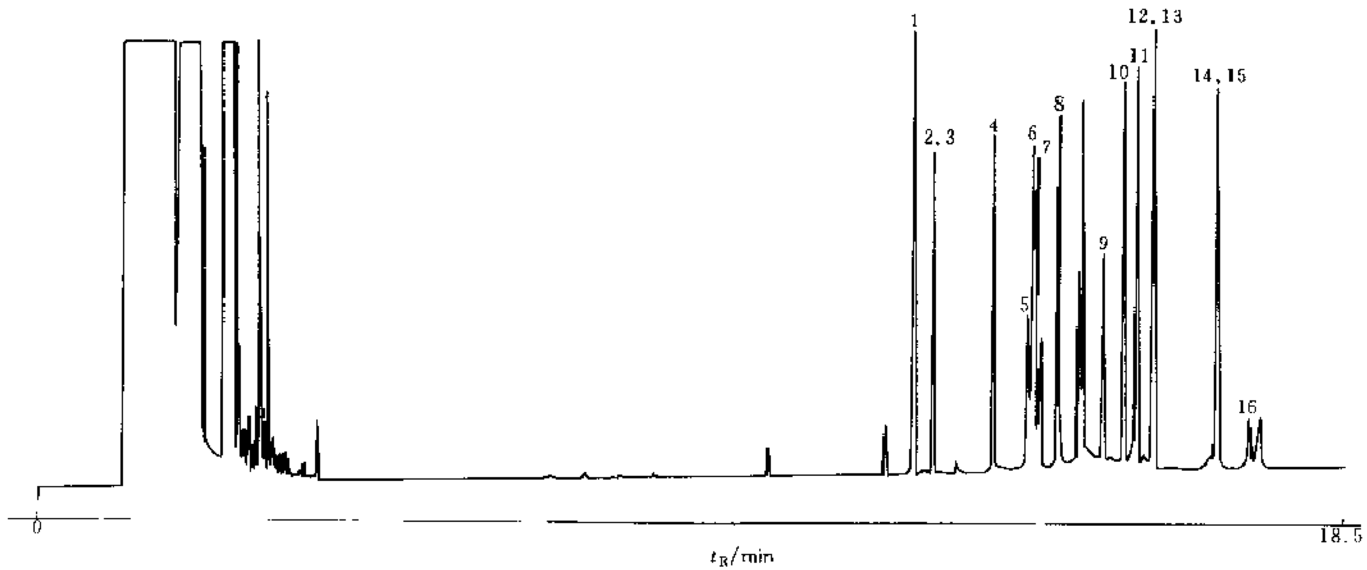


图 28-14 苯二氮䓬类药(TMS 衍生物)[9]

色谱峰：1—去氧安定；2—氯吡二氮䓬；3—去甲安定；4－去甲羟基安定；5—溴吡二氮䓬；6—安定；7 甲嗯安定；8—氯羟去甲安定；9—环丙安定；10—羟基安定；11—氟硝安定；12—氯硝安定；13—氧异安定；14—氟胺安定；15—硝基安定；16—利眠宁

色谱柱：DB 5，30m×0.32mm，d_f＝0.25μm

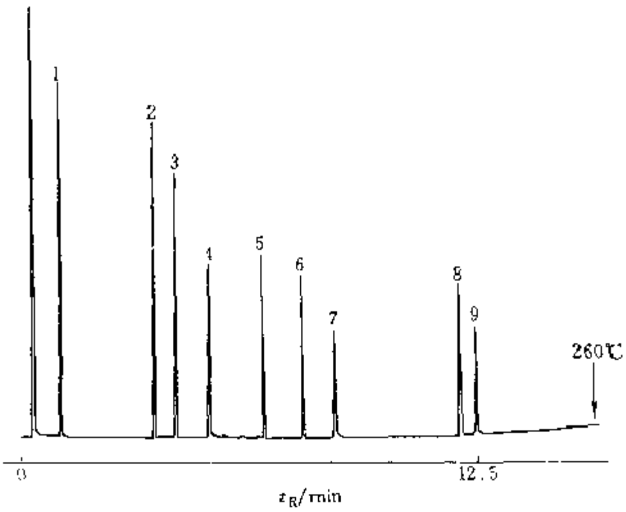
柱　温：55℃(1min)→175℃，30℃·min^{-1}→310℃，10℃·min^{-1}

载　气：He，40cm·s^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：300℃



色谱峰：1- 乙琥胺；2 甲琥胺；3 -苯琥胺；4 N-去甲甲琥胺；5—3-甲基苯乙妥因；6—苯基乙基丙二酰胺；7—5-甲基-5 苯基妥因；8—乙酰嗪；9—扑痫酮

色谱柱：DB 1701，15m×0.25mm，d_f—0.15μm

柱　温：140℃（1min）→260℃，8℃·min^{-1}

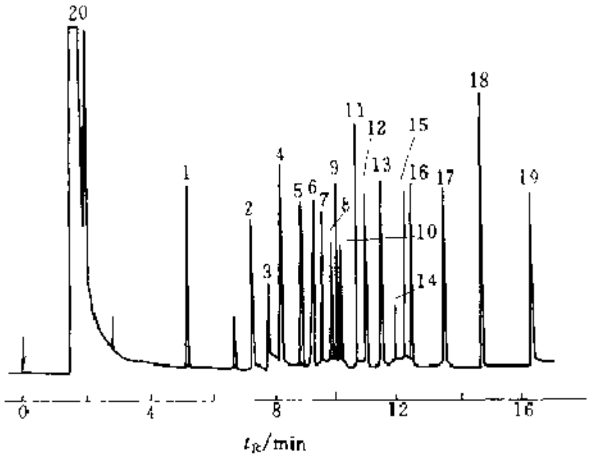
载　气：H_2，37cm·s^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：300℃

图 28-15　抗惊厥药[9]



色谱峰：1-- 巴比妥；2—烯丙异丙巴比妥；3—扑热息痛；4 非那西丁；5—异戊巴比妥；6—戊巴比妥；7—度冷丁；8—安宁；9—司可巴比妥；10—咖啡因；11—导眠能；12—环己巴比妥；13—甲基苯巴比妥；14—茶碱；15—苯巴比妥；16—环巴比妥；17- 乙基(甲苯基)巴比土酸；18—安眠酮；19—对甲基去氧苯比妥；20- 二氯甲烷(溶剂)

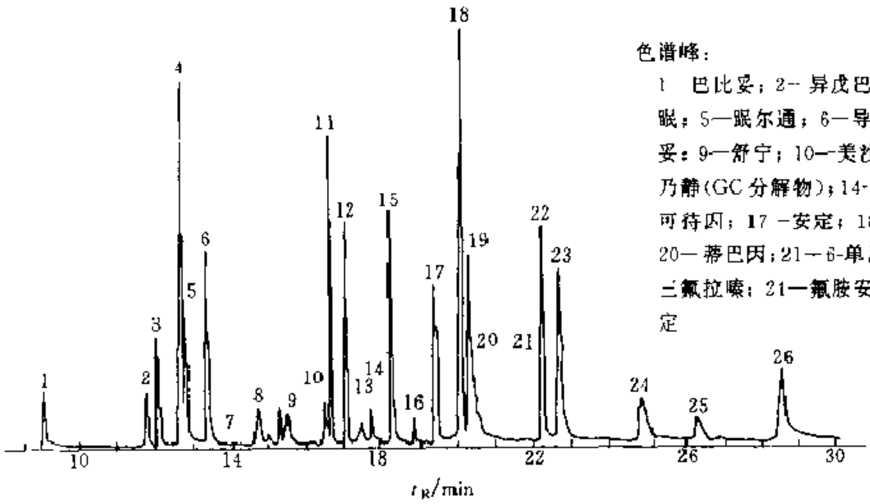
色谱柱：SPB-1，30m×0.75mm

柱　温：155℃（4min）→290℃（10min），8℃·min^{-1}

载　气：He，10ml·min^{-1}

检测器：FID

图 28-16　酸性与中性药物[12]



色谱峰：

1 巴比妥；2-- 异戊巴比妥；3—戊巴比妥；4—速可眠；5—眠尔通；6—导眠能；7—硫喷妥；8—苯巴比妥；9—舒宁；10—美沙酮；11、12--可卡因；13—奋乃静(GC 分解物)；14--异丙嗪；15 -羟基安定；16—可待因；17 -安定；18—氯丙嗪；19 乙酰可待因；20—蒂巴因；21—6-单乙酰基吗啡；22—海洛因；23—三氟拉嗪；24—氟胺安定；25—罂粟碱；26—舒乐安定

图 28-17　镇静、镇痛药(硅烷化衍生物)[13]

色谱柱：SE-54，23m×0.26mm　　检测器：MS

柱　温：100℃(2min)→260℃(12min)，10℃·min^{-1}

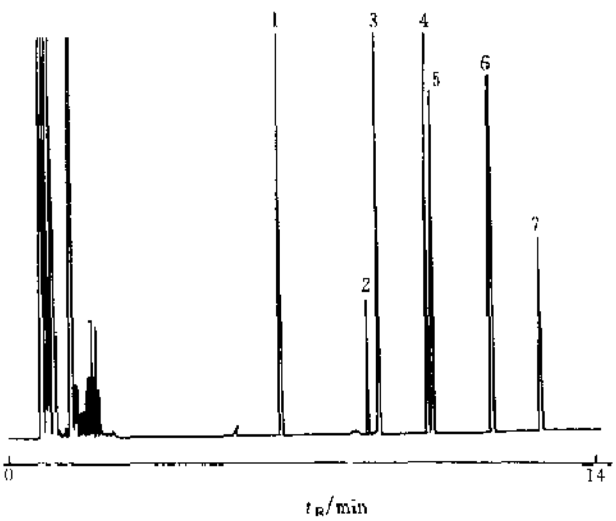


图 28-18　镇痛药(TMS 衍生物)[3-

色谱峰：1—尼古 j；2—未知物；3—阿司匹林；4—布洛芬；5—扑热息痛；6—未知物；7—咖啡因

色谱柱：DB-5，20m×0.18mm，d_f=0.4μm

柱　温：100℃→240℃，10℃·min^{-1}　气化室温度：250℃

载　气：He，39cm·s^{-1}　检测器温度：300℃

检测器：FID

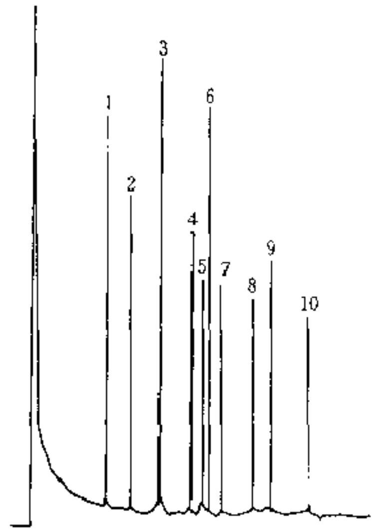


图 28-19　镇痛药 (-·)[16]

色谱峰：1—度冷丁；2　利多卡因；3-—扑尔敏(内标物)；4—安眠明；5—阿托品；6—丙咪嗪；7—异丙嗪；8—安定；9—氯丙嗪；10—三氯拉嗪

色谱柱：SE-30，24m×0.24mm　检测器：NPD

柱　温：180℃→300℃，6℃·min^{-1}　气化室温度：300℃

载　气：N_2　检测器温度：300℃

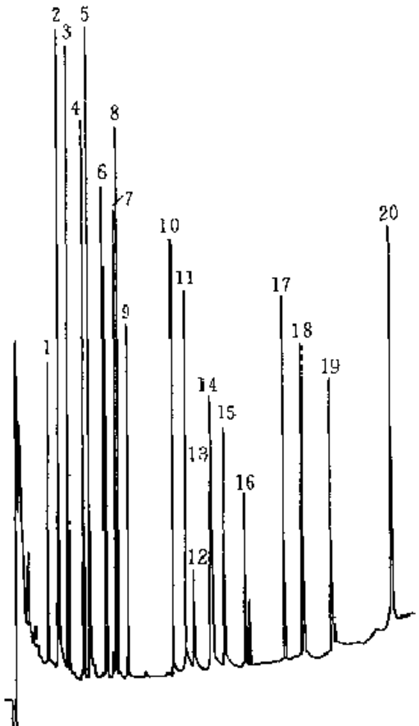


图 28-20　镇痛药 (二)[5]

色谱峰：1—盐酸哌替啶；2—咖啡因；3—盐酸苯环已哌啶；4　盐酸安乃近；5—普鲁卡因；6　去甲美沙酮；7—美沙酮；8—安眠酮；9—可卡因；10—可待因；11—吗啡；12　二氢吗啡酮；13—乙酰可待因；14—6-单乙酰吗啡；15　烯丙吗啡；16—海洛因；17—二乙酰基烯丙吗啡；18—苯丙苯哌酯；19—吗散痛；20—士的宁

色谱柱：CP-Si.8，10m×0.32mm

柱　温：210℃(2min)→300℃，5℃·min^{-1}

载　气：He　　检测器：NPD

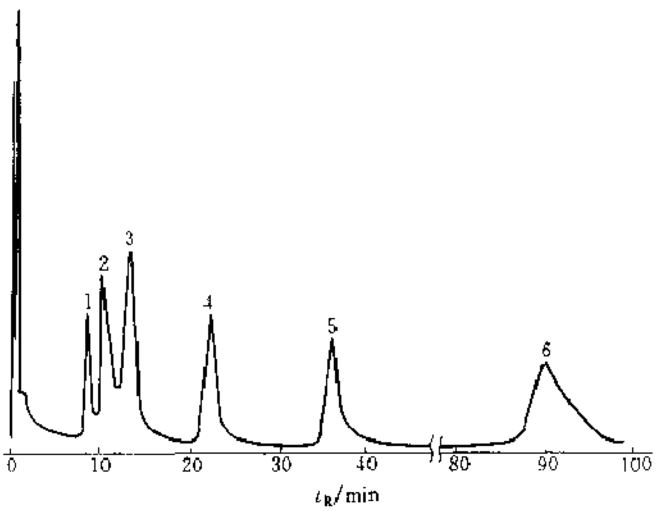


图 28-21　镇痛药 (三)[16]

色谱峰：1—可待因；2—吗啡；3—二甲基吗啡；4 -N-甲四氢罂粟碱；5—罂粟碱；6—格间莨菪品

色谱柱：2% SE-30-Chromosorb W(80 目～100 目)，1.83m×4mm

柱　温：204℃

载　气：Ar



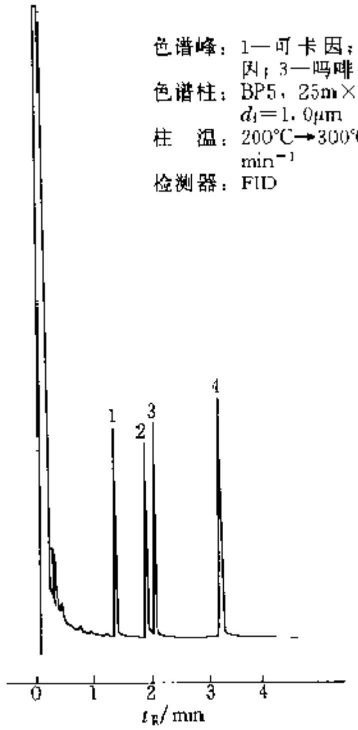
图 28-22 吗啡取代物[4]

色谱峰：1- 可拉明；2—度冷丁；3—氢氮革乙酯；4—非那西丁；5—美沙酮；6 丙氧芬；7—戊唑辛

色谱柱：BP-10，12m×0.22mm，d_f=0.25μm

柱 温：180℃→270℃，12℃・min^{-1}

检测器：FID



色谱峰：1—可卡因；2—可待因；3—吗啡；4—奎宁

色谱柱：BP5，25m×0.53mm，d_f=1.0μm

柱 温：200℃→300℃，25℃・min^{-1}

检测器：FID

图 28-23 生物碱[4]

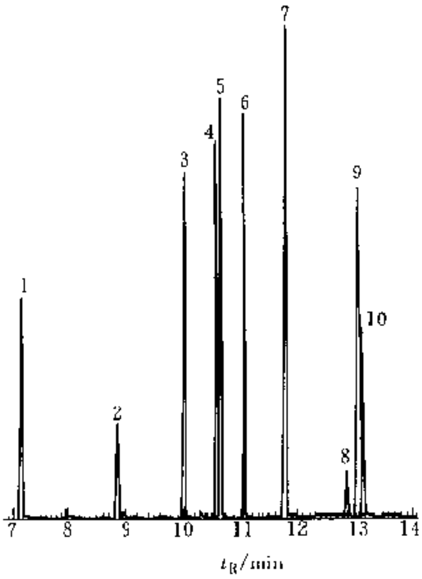


图 28-24 鸦片制剂[4]

色谱峰：1—咖啡因；2—未知物；3 -可待因；4—乙酰可待因；5—单乙酰吗啡；6 海洛因；7—罂粟碱；8—那可丁分解物；9 士的宁；10—那可丁

色谱柱：BP1，12m×0.22mm，d_f=0.25μm

柱 温：75℃(1min)→300℃(3min)，20℃・min^{-1}

检测器：MS

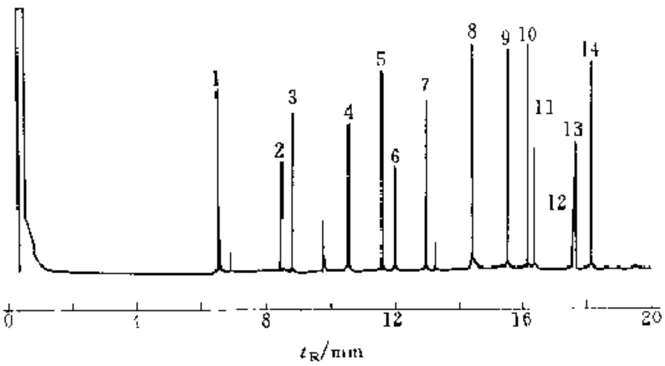


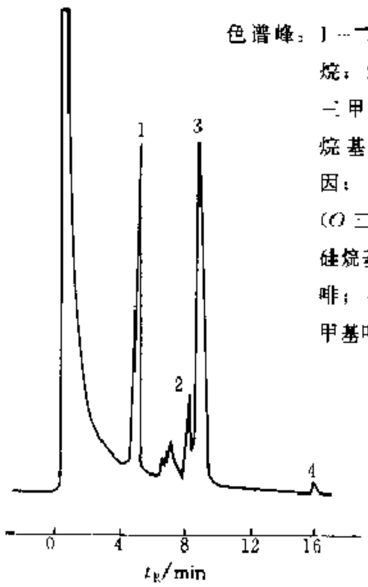
图 28-25 安定药[17]

色谱峰：1—尼古丁；2—巴比妥；3 甲哌啶酮；4—异丁巴比妥；5—哌替啶；6- 咖啡因；7—利多卡因；8—苯甲噻；9—安眠酮；10—阿米替林；11- 丙咪嗪；12—去甲羟基安定；13—可待因；14—安定

色谱柱：甲基硅氧烷，25m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱 温：60℃（1min）→300℃，10℃・min^{-1}

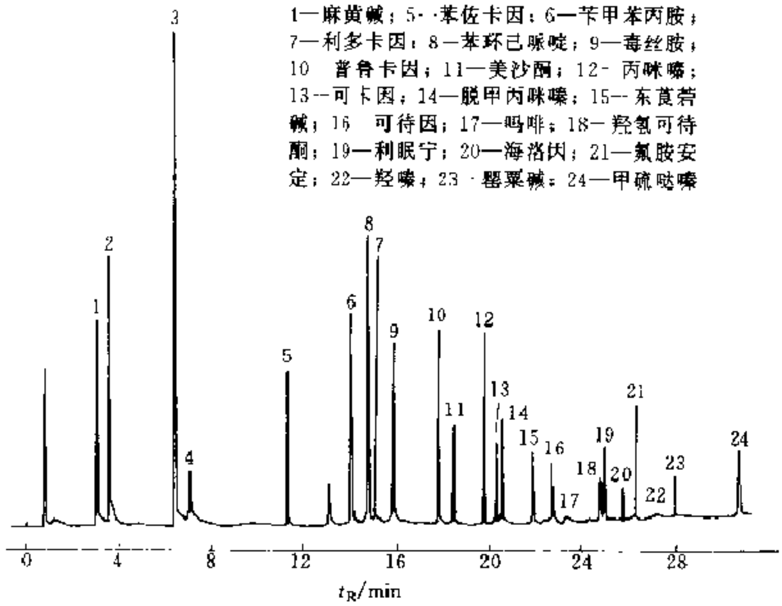
进样方式：用 PTV 毛细管进样（60℃→350℃）



色谱峰：1—二十四烷；2—O-二甲基硅烷基可待因；3—双(O-二甲基硅烷基)吗啡；4—二甲基吗啡

图 28-26 吗啡碱[10]

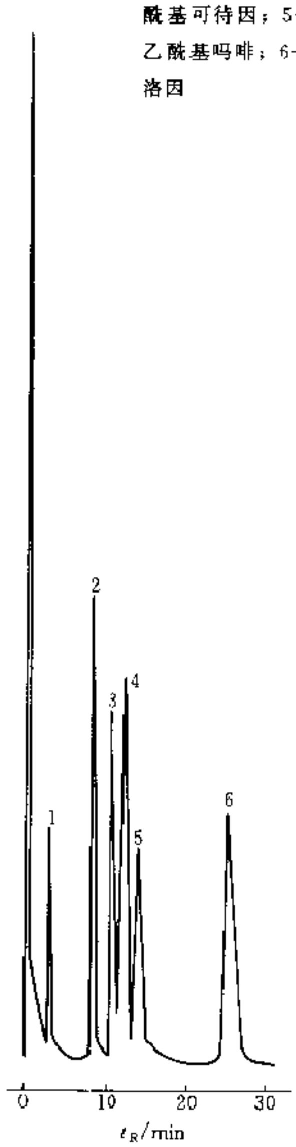
色谱柱：3% Dexsil 300，Supelcoport(100 目～120 目)，2m×2mm
柱 温：250℃
载 气：N_2，30ml·min^{-1}
检测器：FID



色谱峰：
1—苯异丙胺；2—脱氧麻黄碱；3—尼古丁；4—麻黄碱；5—苯佐卡因；6—苄甲苯丙胺；7—利多卡因；8—苯环己哌啶；9—毒丝胺；10—普鲁卡因；11—美沙酮；12—丙咪嗪；13—可卡因；14—脱甲丙咪嗪；15—东莨菪碱；16—可待因；17—吗啡；18—羟氢可待酮；19—利眠宁；20—海洛因；21—氟胺安定；22—羟嗪；23—罂粟碱；24—甲硫哒嗪

图 28-27 碱性药物[12]

色谱柱：SPB-35，30m×0.53mm
柱 温：110℃(2min)→290℃，7℃·min^{-1}
载 气：He，3ml·min^{-1}
检测器：NPD



色谱峰：1—咖啡因；2—可待因；3—吗啡；4—乙酰基可待因；5—6-乙酰基吗啡；6—海洛因

图 28-28 咖啡因[13]

色谱柱：3% OV 210，Diatomite CLQ(80 目～100 目)，2.8m×4mm
柱 温：225℃
载 气：N_2，48ml·min^{-1}
检测器：FID
检测器温度：300℃

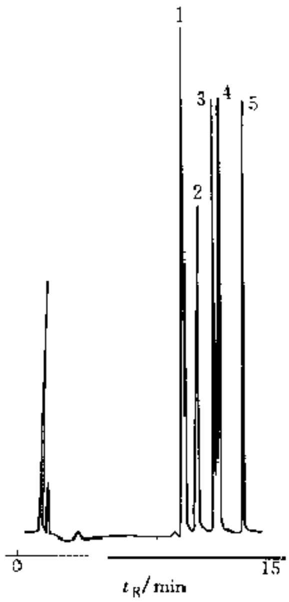


图 28-29　鸦片

色谱峰：1—可待因；2—吗啡；3—乙酰基可待因；4—6-单乙酰基吗啡；5—海洛因

色谱柱：CP-Sil 5，25m×0.22mm

柱　温：200℃（2min）→260℃，5℃·min^{-1}

载　气：He，125kPa　　检测器：NPD

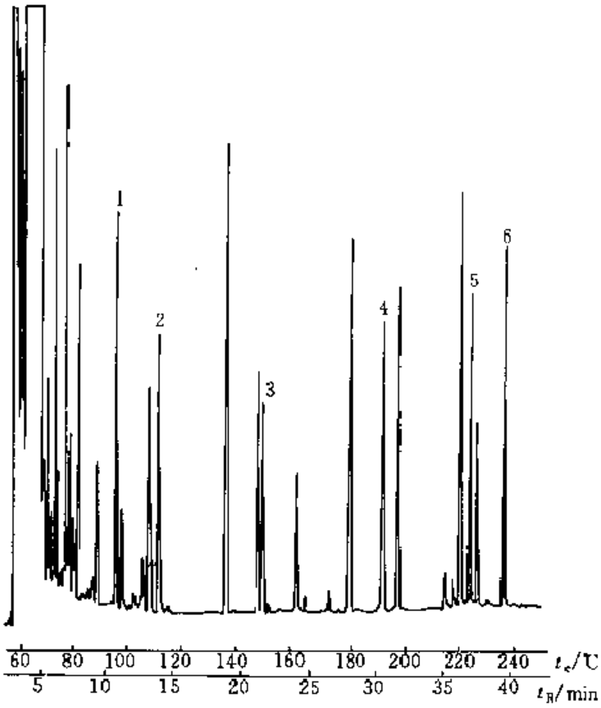


图 28-30　麻醉药（BSA 衍生物）[illegible]

色谱峰：1—安非他明；2—菲曼嗪；3—哌替定；4—美沙酮；5—乙基吗啡；6—海洛因

色谱柱：SE-30，20m

柱　温：50℃→240℃

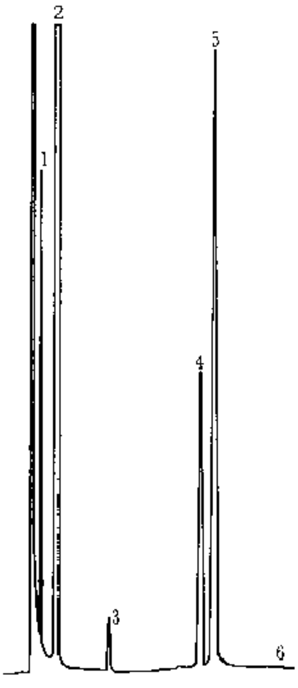


图 28-31　海洛因（TMS 衍生物）[21]

色谱峰：1—水杨酰胺；2—甘露糖；3—噻吡二胺；4—烯丙吗啡；5—奎宁；6—海洛因

色谱柱：2% OV-17，Chromosorb W HP（80 目～100 目），0.61m×2mm

柱　温：150℃→260℃，8℃·min^{-1}

载　气：N_2，30ml·min^{-1}　　气化室温度：250℃

检测器：FID　　检测器温度：300℃

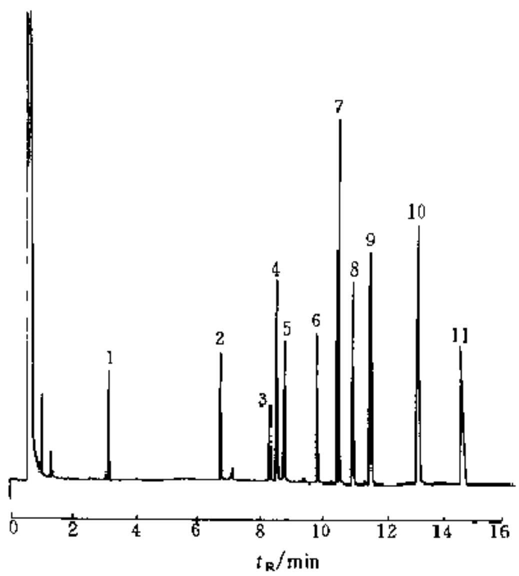


图 28-32　麻醉剂[illegible]

色谱峰：1—己卡因；2—苯佐卡因；3—丙对卡因；4—丙胺卡因；5—利多卡因；6—甲哌卡因；7—丁卡因；8—盐酸丙氧卡因；9—布大卡因；10—地布卡因；11—环甲卡因

色谱柱：BP 1，25m×0.53mm，d_f=1.0μm

柱　温：80℃（1min）→280℃，20℃·min^{-1}

检测器：FID

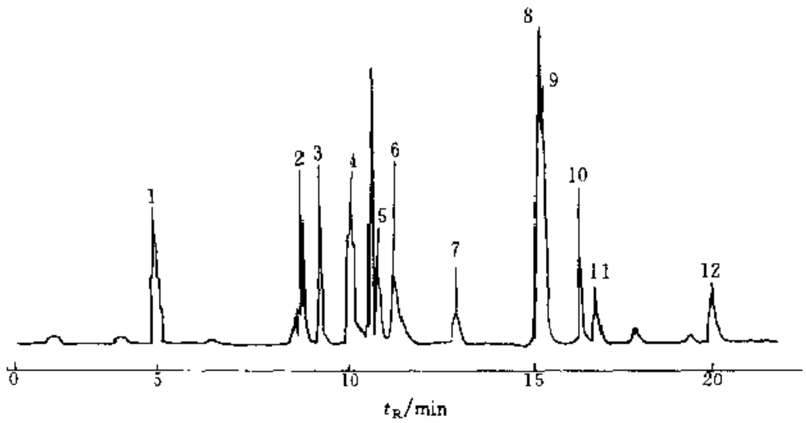


图 28-33 局部麻醉药[22]

色谱峰：1—丁香酚；2—甲丙卡因；3—达可罗宁；4—氨苯丁酯；5—丙胺卡因；6—利多卡因；7—普鲁卡因；8—丙吗卡因；9 丁哌卡因；10—丁氧普鲁卡因；11—布大卡因；12- 地布卡因

色谱柱：SE-54，23m×0.26mm

柱　温：150℃→270℃(10min)，10℃·min⁻¹

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：280℃

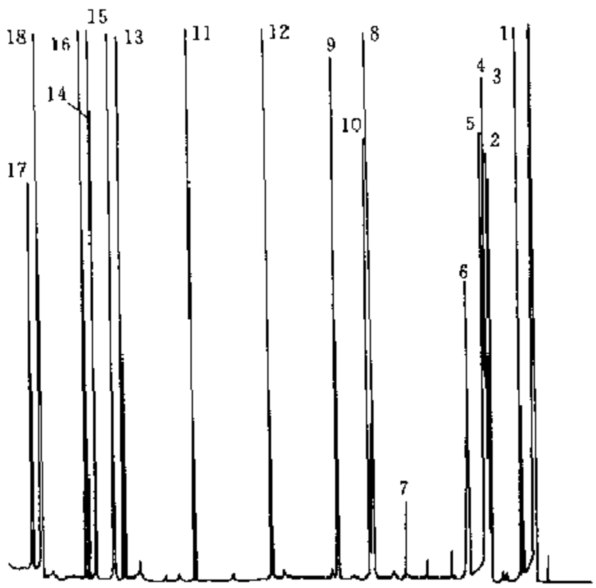


图 28-34 兴奋剂（一）[23]

色谱峰：1—环己丙胺；2—苯异丙胺；3—苯叔丁胺；4—甲基异丙胺；5—乙基异丙胺；6—丙基异丙胺；7—麻黄碱；8 苯乙二苯丙胺（?）；9—苯甲吗啡；10—苯丙氨乙苯碱（?）；11—苯佐卡因；12—甲基非尼丁盐；13—非那西丁；14—普鲁卡因；15—可卡因；16—间奎隆（?）；17—可待因；18—乙基吗啡

色谱柱：氰基(75%)聚硅氧烷，25m

柱　温：70℃（4min）→230℃，5℃·min^{-1}

检测器：FID

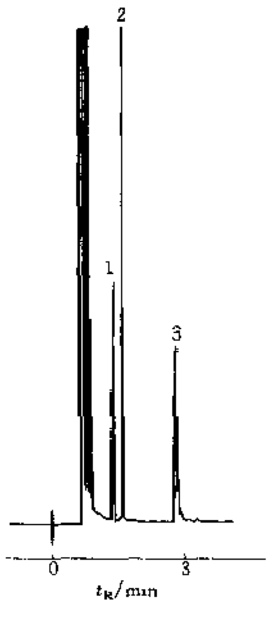


图 28-35 兴奋剂（二）[4]

色谱峰：1—苯丙胺；2—甲基苯丙胺；3—麻黄碱

色谱柱：BP1，25m×0.53mm，d_f=1.0μm

柱　温：150℃

检测器：FID

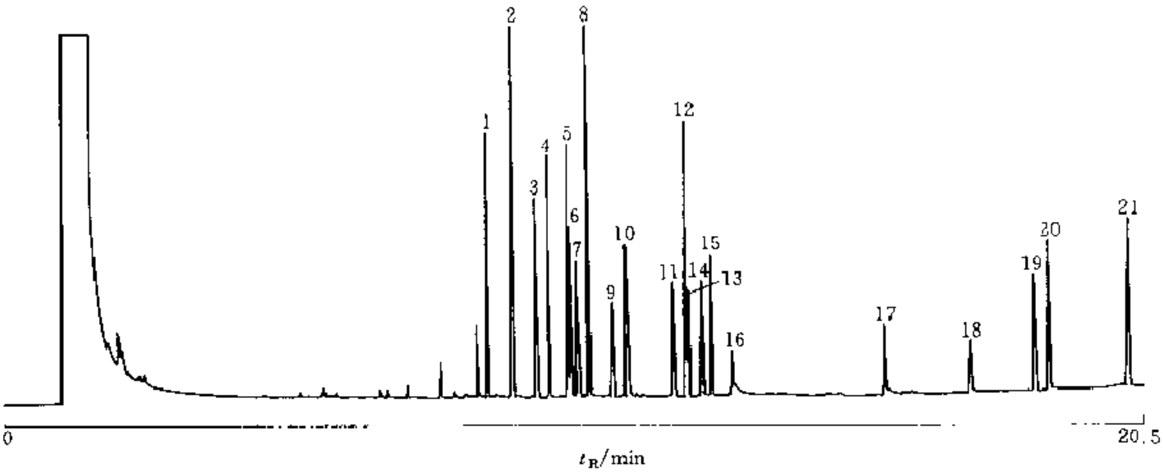


图 28-36　抗组胺药（一）[1]

色谱峰：1—抗感明；2—苯苯醇胺＋苯海拉明；3—苯吡甲醇胺；4—苯基甲苯氧胺；5—苄吡二胺；6－噻吡二胺；7—扑尔敏；8—苯甲嗪；9—氯苯吡醇胺；10－二苯甲氧甲哌啶＋溴抗感明；11—苄嘧二胺；12—氯环嗪；13—新安替根；14—吡咯吡胺；15—异丙嗪；16—安他唑啉；17　氯咪唑；18—羟嗪；19—氯苯甲嗪；20—肉桂苯哌嗪；21—氯苯丁嗪

色谱柱：DB-5，30m×0.32mm，d_f＝0.25μm

柱　温：55℃（1min）→175℃，30℃・min^{-1}→320℃（1min），10℃・min^{-1}

载　气：He，40cm・s^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：300℃

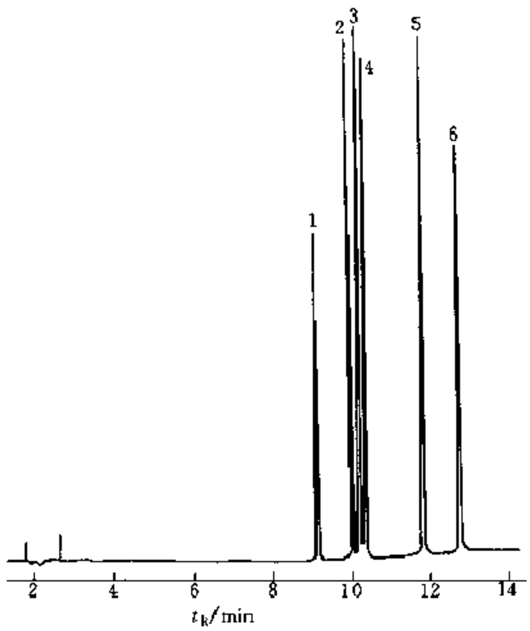


图 28-37　抗组胺药（二）[24]

色谱峰：1—N,N-二甲基-2［1-苯基-1-（2-吡啶并）乙氧基］乙胺；2—2-［苄基（2-二甲基氨基乙基）-2 噻吩甲基氨基］吡啶；3—2-［（2-二甲基氨基乙基）-2-噻吩甲基氨基］吡啶；4—2［（2-二甲基氨基乙基）3-噻吩甲基氨基］吡啶；5—2［（5-氯-2-噻吩甲基）（-2 二甲基氨基乙基）氨基］吡啶；6—2［（2 二甲基氨基乙基）（对甲氧基苄基）氨基］吡啶＋反 2［3-（1-吡咯烷基）-1-对甲苯基丙烯基］吡啶

色谱峰：DB 1701，25m×0.25mm，d_f＝0.25μm

柱　温：200℃(6min)→280℃(6min)，20℃・min^{-1}

载　气：He，23cm・s^{-1}

检测器：NPD　　检测器温度：300℃

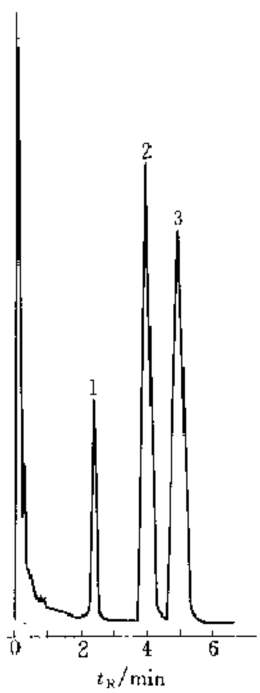


图 28-38　青霉素[24]

色谱峰：1—5-α-胆甾烷；2—青霉素 G；3—青霉素 V

色谱柱：2% OV-17，Supelcoport(80 目～100 目)；0.66m×4mm

柱　温：245℃

载　气：He，200ml・min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：275℃

检测器温度：275℃

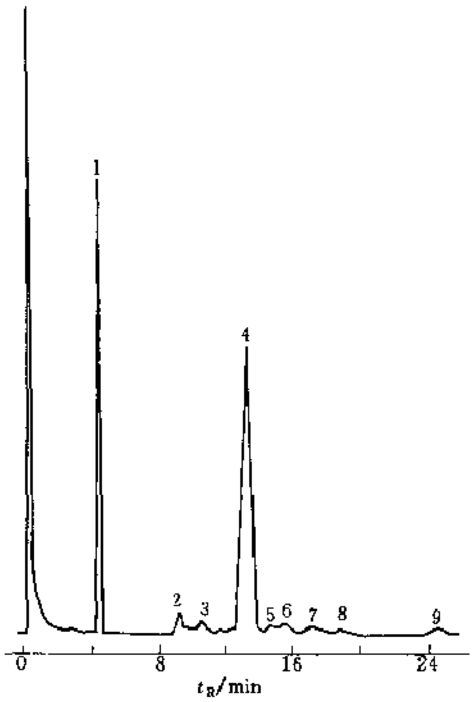


图 28-39 红霉素[26]

色谱峰：1—内标物；2—红霉素A酸解物；3—红霉素C；4—红霉素A；5—红霉素A异构体Ⅰ；6—红霉素A异构体Ⅱ；7—红霉素B；8—脱水红霉素A；9—红霉素A异构体Ⅲ

色谱柱：3% OV 225，Gas Chrom Q（100目～120目），1.85m×3mm

柱 温：275℃

载 气：H_2，40ml・min^{-1}

检测器：FID

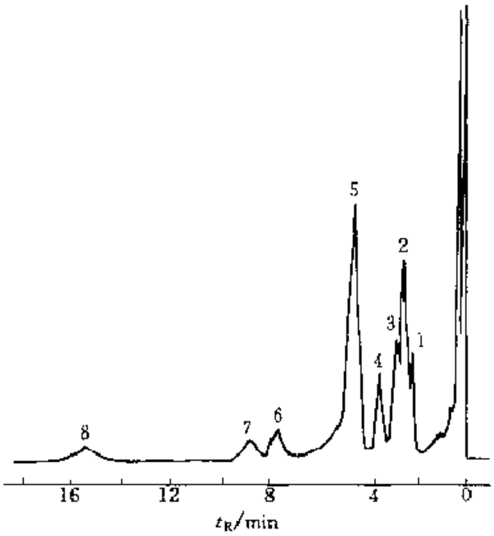


图 28-40 磺胺药（水解产物）[27]

色谱峰：1—磺胺嘧啶；2—磺胺吡啶，3—磺胺甲基嘧啶；4—磺胺二甲基嘧啶；5—6-氨基-2，4-二甲基吡啶；6—磺胺噻唑；7—磺胺甲基噻唑；8—磺胺二甲基异嘧啶

色谱柱：3% Carbowax 20M、Chromosorb W AW（80目～100目），0.80m×3mm

柱 温：132℃

载 气：He，100ml・min^{-1}　　气化室温度：250℃

检测器：FID　　检测器温度：250℃

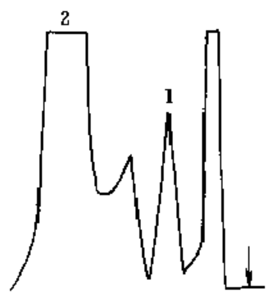


图 28-41 甲地孕醇[28]

色谱峰：1—炔雌醇；2—甲地孕醇

色谱柱：2.5% OV-1，Celite 545 酸洗硅烷化（60目～80目），2m×3mm

柱 温：255℃

载 气：N_2，4ml・min^{-1}

检测器：FID

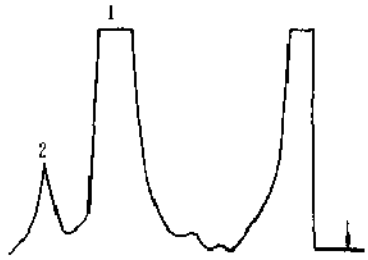


图 28-42 避孕药[28]

色谱峰：1—炔诺酮；2—炔雌醇

色谱柱：3% OV-225，Celite 545 酸洗硅烷化（60目～80目），2m×3mm

柱 温：255℃

载 气：N_2，27ml・min^{-1}

检测器：FID

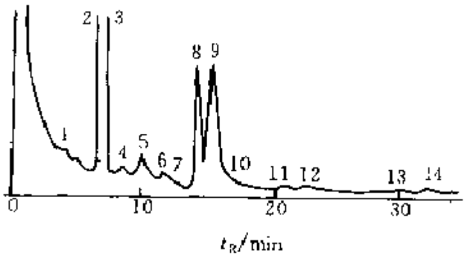


图 28-43　大环酮[29]

色谱峰：1—C_{14}-环烷酮；2—C_{15} 环烷酮；3—C_{15}-环烯酮；4—未知物；5—C_{16}-环烷酮；6—C_{16}-环烯酮；7—未知物；8—C_{17}-环烷酮；9—C_{17}-环烯酮；10—未知物；11—C_{18}-环烷酮；12—C_{18} 环烯酮；13—C_{19}-环烷酮；14—C_{19}-环烯酮

色谱柱：4.91% PEG-20M＋3.33% SE-30，Chromosorb W HP(80 目～100 目)，2m×2mm

柱　温：170℃

载　气：N_2，9ml・min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：220℃

检测器温度：220℃

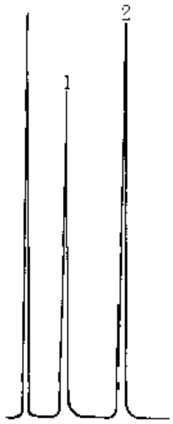


图 28-44　苯基丙醇胺[30]

色谱峰：1—苯基丙醇胺；2—1-甲基-5-苯基噁唑硫-2-酮

色谱柱：3%　OV-17，Gas Chrom Q(80 目～100 目)，1.22m×3mm

柱　温：130℃（5min）→240℃，32℃・min^{-1}

载　气：He，50ml・min^{-1}

检测器：FID

检测器温度：220℃

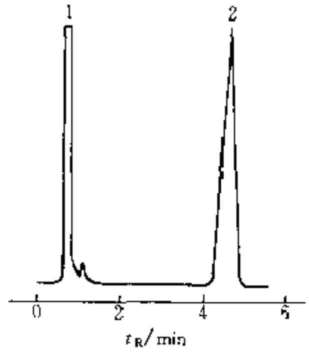


图 28-45　阿司匹林[31]

色谱峰：1—三氯甲烷；2—阿司匹林

色谱柱：0.25% Carbowax＋0.4%间苯二甲酸，玻璃球(200μm)，2m×6mm

柱　温：125℃

载　气：He，60ml・min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250℃

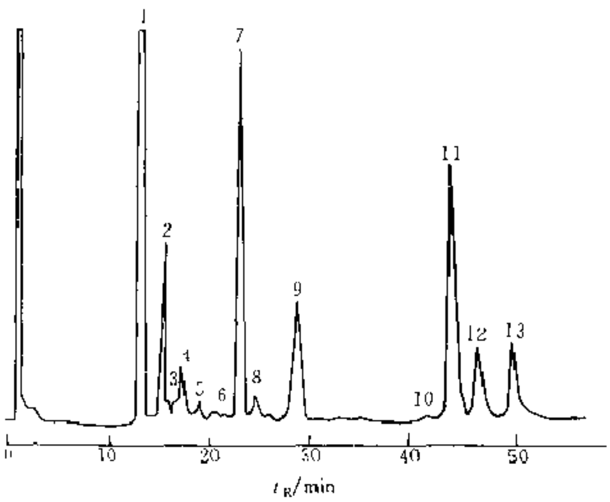


图 28-46　粗榧生物碱[32]

色谱峰：1—粗榧碱；2—高赤藓生物碱；3—合成粗榧碱酮；4—drupacine；5—乙酰粗榧碱＋11-羟基粗榧碱＋去甲基粗榧碱酮；6—高赤藓素生物碱；7—二十四碳烷(内标物)；8—粗榧碱酮；9—未知物；10—去氧三尖杉酯碱；11—异三尖杉酯碱；12—三尖杉酯碱；13—高三尖杉酯碱

色谱柱：3% Dexsil 300、Gas Chrom Q（100 目～120 目)，1.22m

柱　温：180℃→285℃，2℃・min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：245℃

检测器温度：290℃

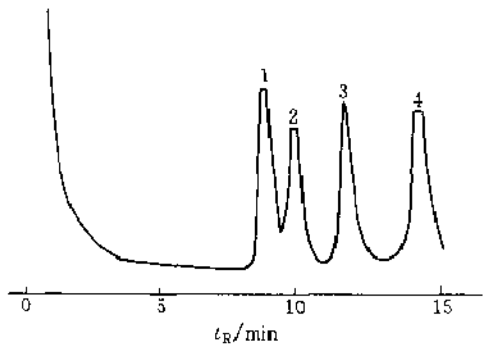


图 28-47　二氢麦角毒素碱[33]

色谱峰：1—二氢麦角考宁；2—二氢麦角隐宁；3—苯基丁氮酮；4—二氢麦角啃亭

色谱柱：2% Dexsil 300，Gas Chrom Q(80 目～100 目)，1m×3.2mm

柱　温：180℃→280℃，5℃・min^{-1}

载　气：N_2，11.5ml・min^{-1}

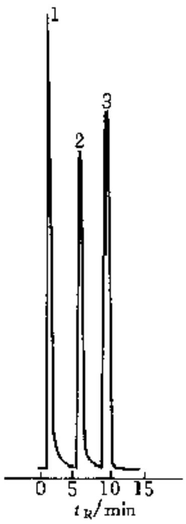


图 28-48 酰胺咪嗪[34]

色谱峰：1—氯仿(溶剂)；2—酰胺咪嗪；3—安眠酮(内标)

色谱柱：2% OV-17，Chromosorb W AW DMCS（60 目～80 目），4m×3mm

柱　温：250℃

载　气：N_2，20ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：300℃

检测器温度：300℃

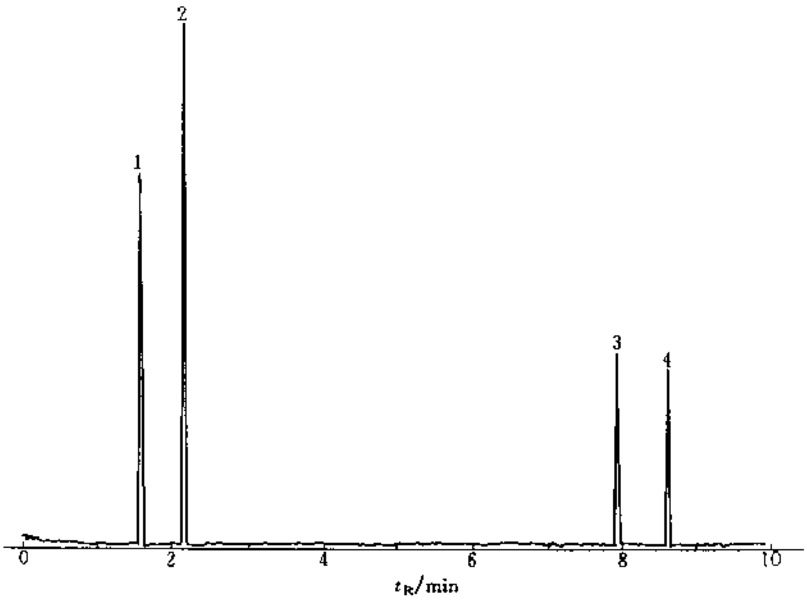


图 28-49 可卡因与代谢物（TMS 衍生物）[9]

色谱峰：1—爱康宁甲酯；2—爱康宁；3—可卡因；4—苯甲酰爱康宁

色谱柱：DB-5，20m×0.18mm，d_f=0.4μm

柱　温：200℃（1min）→300℃，10℃·min^{-1}

载　气：He，36cm·s^{-1}

检测器：MS

气化室温度：250℃

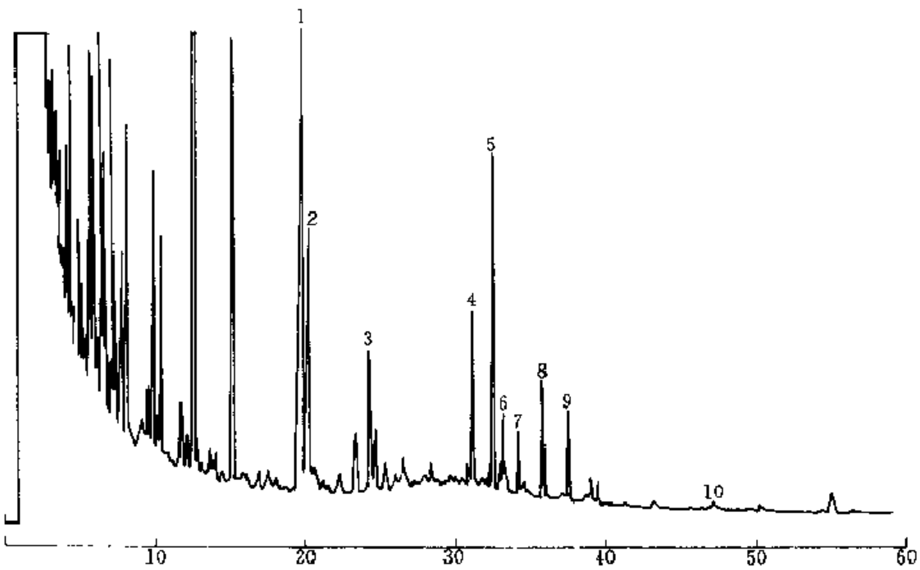


图 28-50 马雌激素水解提出物(BDMS 衍生物)[35]

色谱峰：1—雌酮；2—马烯雌酮；3—去氢马烯雌酮；4—17α-雌二醇；5—17α-二氢马烯雌酮；6—17β-雌二醇；7—17β-二氢马烯雌酮；8—17α-二氢去氢马烯雌酮；9—17β-二氢去氢马烯雌酮；10—雌三醇

色谱柱：SE-30，15m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱　温：235℃（19min）→290℃，5℃·min^{-1}

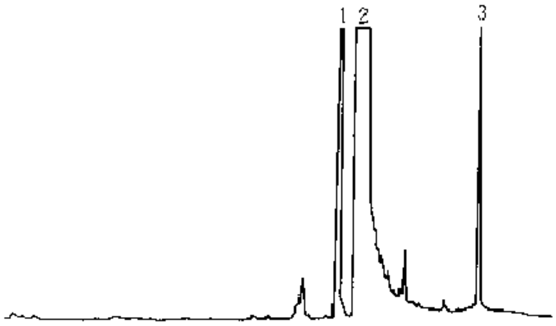
载　气：H_2，1.1ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：300℃

检测器温度：300℃

第二节　中药类物质色谱图



色谱峰：1—β-丁香烯；2—丁香油酚；3—乙酰基丁香油酚

色谱柱：OV-17，50m×0.25mm

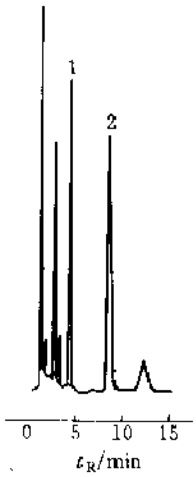
柱　温：70℃→160℃，30℃·min^{-1}→190℃（20min），1.5℃·min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FID

闪蒸温度：裂解炉闪蒸温度为250℃，时间0.5min

图 28-51　丁香[30]



色谱峰：1—苯甲醇（内标）；2—丁香酚

色谱柱：10% PEG 20M，1.1m×3.2mm（载体不详）

柱　温：170℃

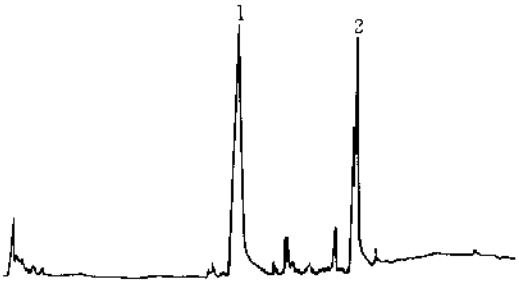
载　气：N_2，35ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：210℃

检测器温度：210℃

图 28-52　丁香胃灵散中丁香酚[36]



色谱峰：1—L-薄荷醇；2—薄荷酮

色谱柱：OV-17，50m×0.25mm

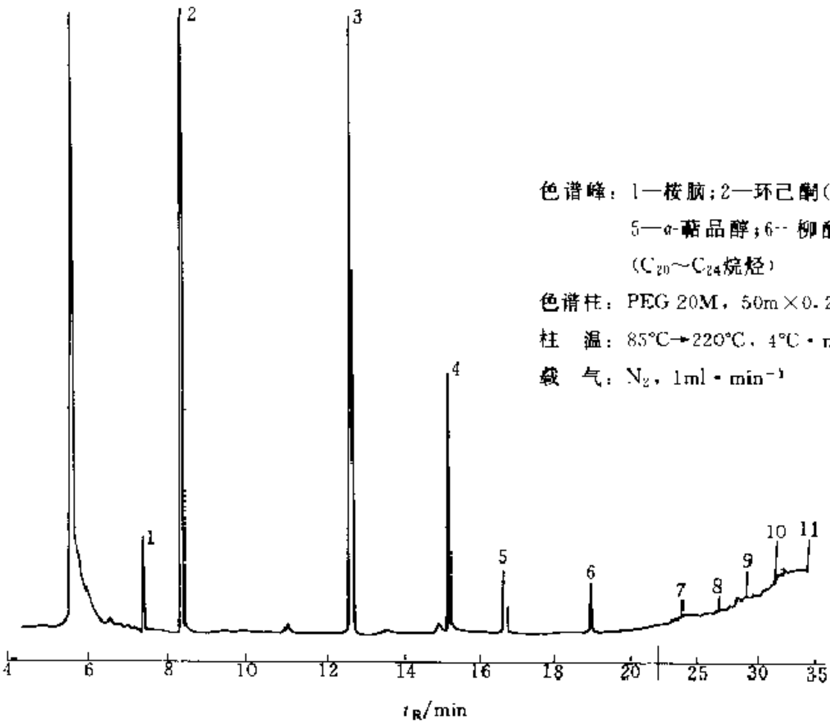
柱　温：70℃→160℃，3℃·min^{-1}→190℃（20min），3℃·min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FID

闪蒸温度：裂解炉闪蒸温度为250℃，时间0.5min

图 28-53　薄荷[17]



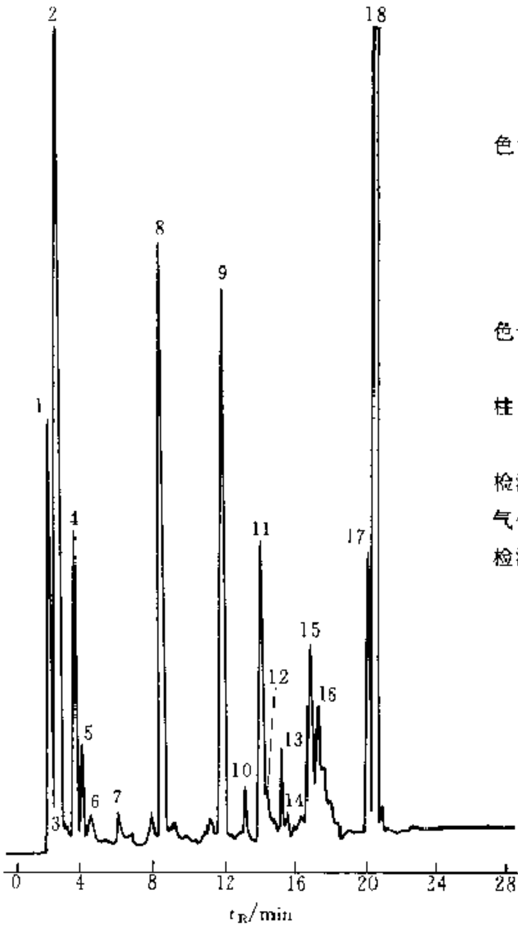
色谱峰：1—桉脑；2—环己酮(内标)；3—樟脑；4—薄荷醇；5—α-萜品醇；6—柳酸甲酯；7～11—凡士林组分(C_{20}～C_{24}烷烃)

色谱柱：PEG 20M，50m×0.25mm

柱　温：85°C→220°C，4°C·min^{-1}

载　气：N_2，1ml·min^{-1}

图 28-54　薄荷膏提取液[38]



色谱峰：1—α 蒎烯；2—莰烯；3—β 蒎烯；4—蒈烯；5—柠檬烯；6—桉叶烯；7—芳樟醇；8—樟脑；9—α-胡椒烯；10—反丁香烯；11—香树烯；12—γ-衣兰油烯；13—未知物；14—杜松烯；15—未知物；16—未知物；17—二氢姜三七酮；18—姜三七酮

色谱柱：4.5% OV-17，Celite 545 AW-DMCS(80 目～100 目)，2m×3mm

柱　温：90°C→140°C，5°C·min→240°C（8min），10°C·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：220°C

检测器温度：280°C

图 28-55　姜三七挥发油[illegible]

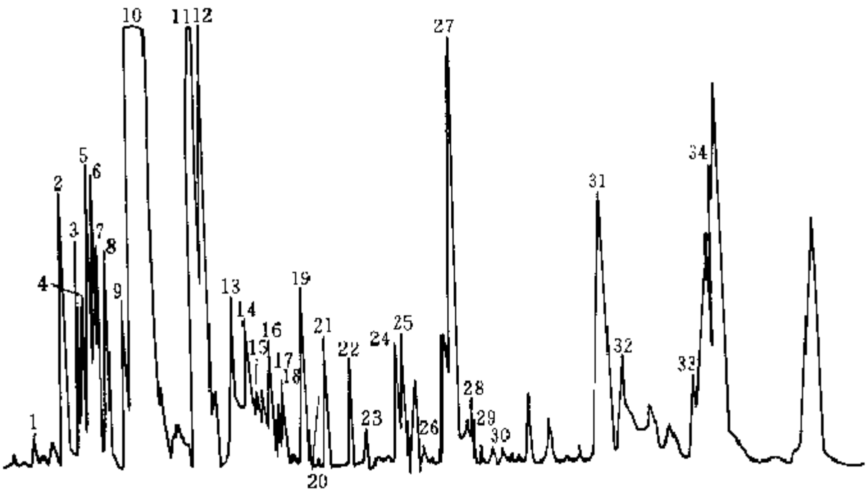


图 28-56　千年健挥发油[40]

色谱峰：1—α-蒎烯；2—月桂烯；3—α-水芹烯；4—α-松油烯；5—α-柠檬烯；6—Δ³ 蒈烯；7—对聚伞花素；8—水化桧香烯；9—橙花醇；10—芳樟醇；11—松油烯-4-醇；12—α-松油醇；13—隐品酮；14—2-甲基-6 亚甲基-1，7 辛二烯 3-酮；15—α-玷𤂖烯；16—胡椒酮；17—3，7-二甲基辛二烯-2，6 酸 甲酯；18—1，3，4-三甲基环己烯-3 甲醛；19—反-β-金合欢烯；20—正十五烷；21—顺-β-金合欢烯；22—反石竹烯；23—雅槛蓝树油烯；24—α-葎草烯；25—别香橙烯；26—β-甜没药烯；27—δ 荜橙茄烯；28—α-衣兰油烯；29—去氢白菖烯；30—橙花叔醇；31—石竹烯氧化物；32—喇叭醇；33—胡萝卜次醇；34—榧叶醇

色谱柱：OV 17，50m×0.25mm　　检测器：MS

柱　温：90℃→180℃（20min），3℃·min^{-1}→195℃，1℃·min^{-1}　　气化室温度：250℃

载　气：He，37.26kPa

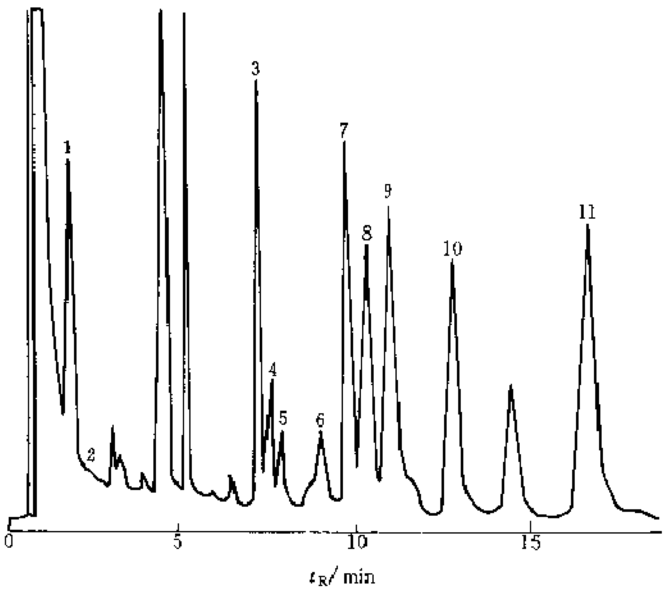


图 28-57　跌打万花油[41]

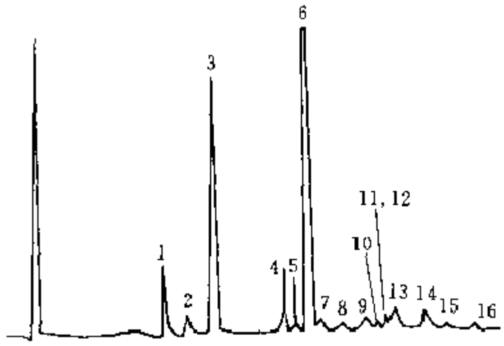
色谱峰：1—α-蒎烯；2—β-蒎烯；3—薄荷酮；4—异薄荷酮；5—樟脑；6—新薄荷醇；7—薄荷醇；8—异龙脑；9—龙脑；10—水杨酸甲酯；11—苯甲醇（内标物）

色谱柱：3% FFAP，Chromosorb W AW-DMCS(60 目～80 目），3m×3mm

柱　温：55℃（2min）→130℃（20min），21℃·min^{-1}　　气化室温度：226℃

载　气：N_2，15ml·min^{-1}　　检测器温度：210℃

检测器：FID



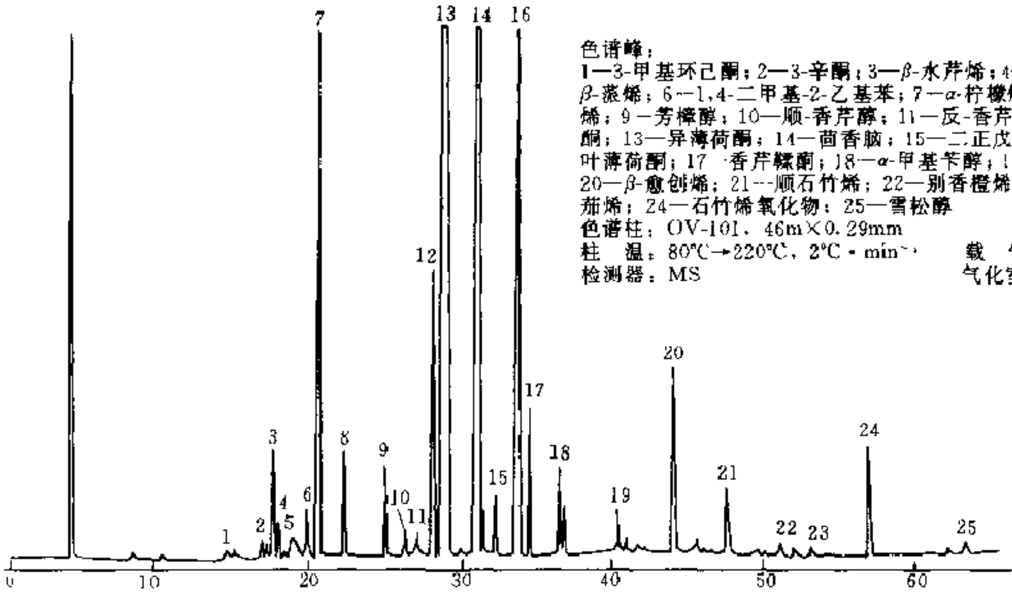
色谱峰：1—α-蒎烯；2—β-蒎烯；3—桉脑；4—樟脑；5—薄荷酮；6—水杨酸甲酯；7—未知物；8—异佛尔酮；9—乙酸盖酯；10—癸二酸乙二基酯；11—胡椒醛；12—4-甲基-2-戊醇乙酸酯；13—丁香酚；14—未知物；15—水杨酸丁酯；16—未知物

色谱柱：SE-30，50m×0.32mm

柱　温：70℃→230℃，5℃・min⁻¹

检测器：FID

图 28-58　本草油[42]



色谱峰：

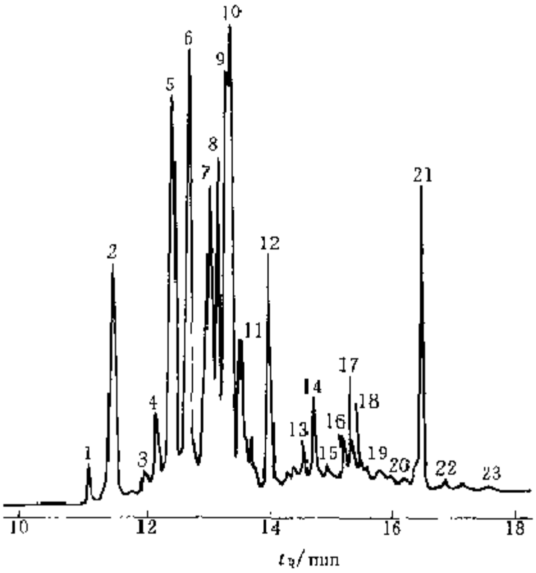
1—3-甲基环己酮；2—3-辛酮；3—β-水芹烯；4—α-蒎烯；5—β-蒎烯；6—1,4-二甲基-2-乙基苯；7—α-柠檬烯；8—γ-萜品烯；9—芳樟醇；10—顺-香芹醇；11—反-香芹醇；12—薄荷酮；13—异薄荷酮；14—茴香脑；15—二正戊基酮；16—长叶薄荷酮；17—香芹鞣酮；18—α-甲基苄醇；19—胡椒烯酮；20—β-愈创烯；21—顺石竹烯；22—别香橙烯；23—Δ-荜橙茄烯；24—石竹烯氧化物；25—雪松醇

色谱柱：OV-101，46m×0.29mm

柱　温：80℃→220℃，2℃・min⁻¹　　载　气：He

检测器：MS　　气化室温度：260℃

图 28-59　茴藿香精油[43]



色谱峰：1—异壬基苯；2—α-康杷烷；3—β-绿叶烯；4—β-石竹烯；5—α-枯依烯；6—β-芹子烯；7—α-黑吗查烯；8—雅槛兰树油烯；9—β-枯依烯；10—真蒲二烯；11—1,2,4α,5,8,8α-六氢-4,7-二甲基-1-异丙基萘；12—3,7,11-三甲基-7-乙基-2,6,10-十二碳三烯醇；13—十六烷；14—α-石竹烯醇；15—β-雪多罗醇；16—雪松醇；17—β-黑吗查烯；18—喇叭醇；19—十七烷；20—愈创醇；21—苯甲酸苄酯；22—正二十烷；23—正二十一烷

色谱柱：OV-101，25m×0.2mm

柱　温：100℃→200℃，8℃・min⁻¹

载　气：He

检测器：MS

气化室温度：280℃

图 28-60　木豆精油[45]

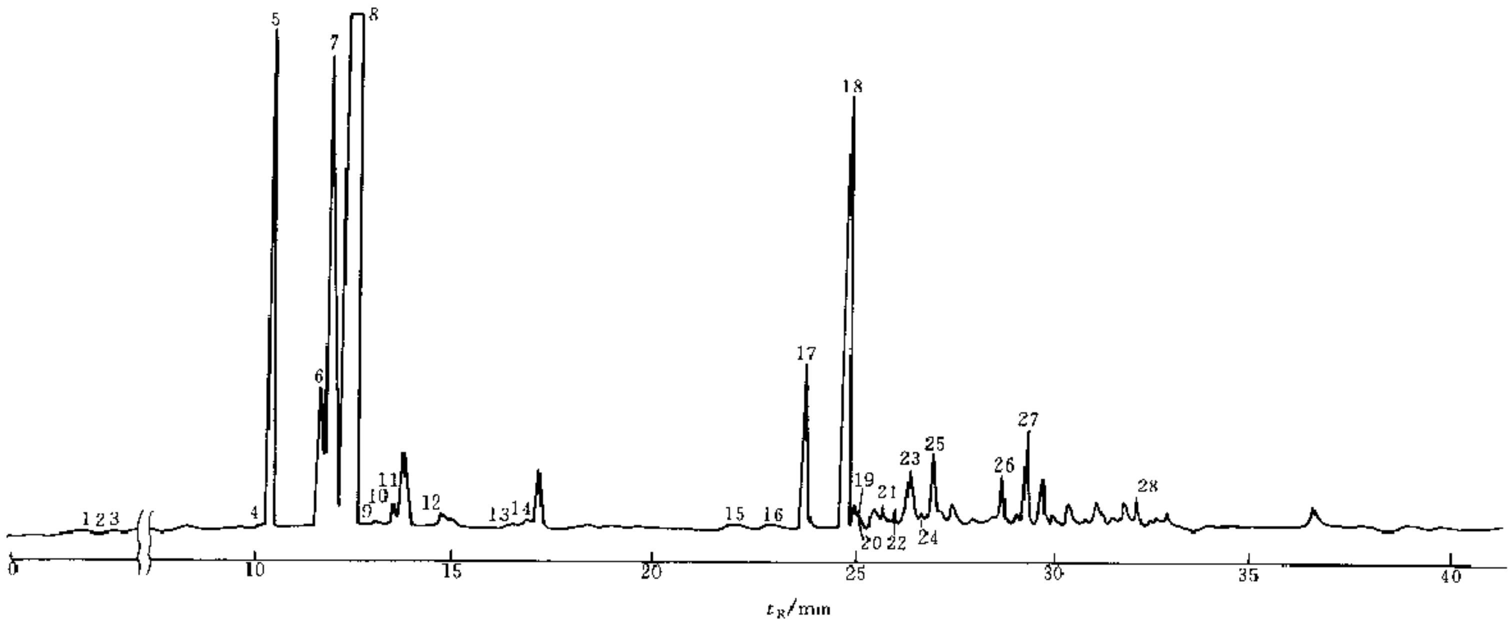


图 28-61　吴茱萸挥发油[44]

色谱峰：1—丙酮；2—3-丁烯基-2-酮；3—2-甲基-3-丁烯-2-醇；4—异戊酸异丁酯；5—月桂烯；6—β-侧柏烯＋柠檬烯；7—β-顺罗勒烯；8—β-反罗勒烯；9—反里哪醇氧化物；10—顺里哪醇氧化物；11—里哪醇；12—3(4-甲基-3-戊烯基)-呋喃；13—萘；14—δ-松油醇；15—α-榄香烯；16—橙牛儿醇乙酸酯；17—β-榄香烯；18—反石竹烯；19—α-佛手柑油烯；20—β-反金合欢烯；21—葎草烯；22—异甲基-丁香酚；23—别香橙烯＋β-库比烯；24—β-甜没药烯；25—σ-毕澄茄烯；26—γ-榄香烯；27—石竹烯氧化物；28—2-十五烷酮

色谱柱：OV-101，30m×0.28mm

柱　温：50℃（1min）→210℃，4℃·min⁻¹

载　气：He

检测器：MS

气化室温度：240℃

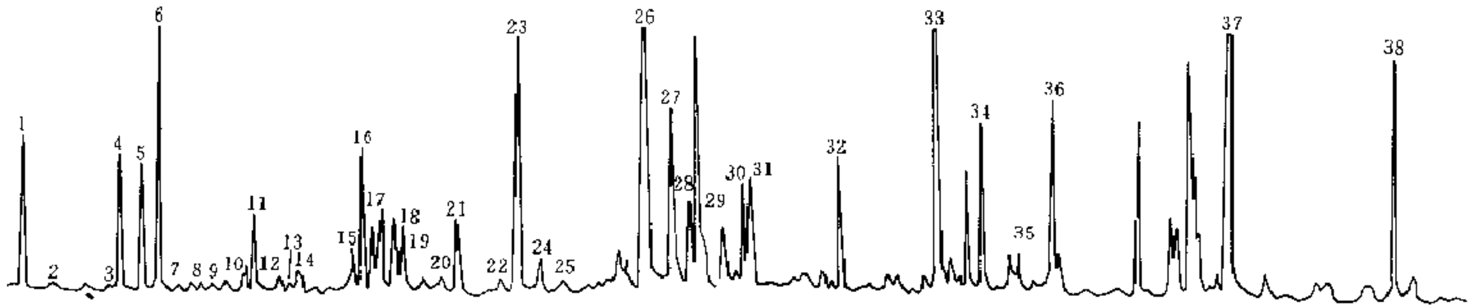


图 28-62　没药挥发油[46]

色谱峰：1—δ-榄香烯；2—α-荜澄茄烯；3—α-依兰烯；4—α-玷巴烯；5—β-波旁烯；6—β-榄香烯；7—莎草烯；8—α-古芸烯；9—Z-α-顺-香柠檬烯；10—β-柏木烯；11—γ-榄香烯；12—Z-α-反-香柠檬烯；13—α-愈疮木烯；11—α-葎草烯＋别香树烯＋γ-古芸烯；15—大根香叶烯D异构体#3；16—大根香叶烯D；17—β-瑟林烯；18—α-瑟林烯；19—莪术烯；20—γ-杜松烯；21—δ-杜松烯；22—α-甜旗烯；23—榄香醇；24—大根香叶烯B＋β-甜旗烯；25—斯巴醇；26—蓬莪术酮；27—表蓬莪术酮；28—呋喃桉叶-1,3-二烯；29—τ-杜松醇；30—β-桉叶醇；31—α-桉叶醇；32—大根香叶酮；33—4,5-二氢呋喃二烯-6-酮；34—呋喃桉叶-1,4-二烯-6-酮；35—异呋喃二烯酮；36—呋喃二烯酮；37—2-甲氧基-4,5-二氢呋喃二烯-6-酮；38—2-甲氧基-呋喃愈疮木-9-烯-8-酮

色谱柱：DB-5，30m×0.25mm

柱　温：60℃→240℃，3℃·min^{-1}→300℃，10℃·min^{-1}

载　气：He，30cm·s^{-1}

检测器：MS

气化室温度：250℃

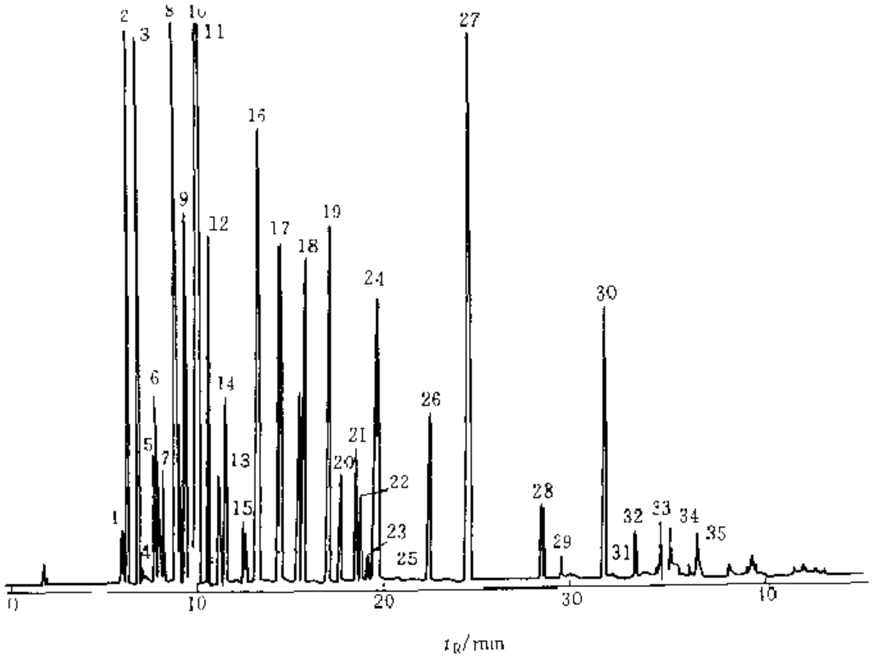


图 28-63 四方蒿精油[47]

色谱峰：1—α-侧柏烯；2—α-蒎烯；3—樟烯；4—苯甲醛；5—香桧烯；6—β-蒎烯；7—月桂烯；8—α-水芹烯；9—α-松油烯；10—对伞花烃；11—1,8-桉叶素；12—β-罗勒烯；13—γ-松油烯；14—苯乙酮；15—α-异松油烯；16—芳樟醇；17—水合桧烯；18—樟脑；19—龙脑；20—松油烯-4-醇；21—月桂醇；22—松油醇；23—香芹酮；24—用 GC-MS 鉴定，其 M_r=154，基峰 84；25—橙花醇；26—胡椒酮；27—乙酸龙脑酯；28—丁香酚；29—胡椒烯；30—反-丁香烯；31—γ-杜松烯；32—β-芹子烯；33—γ-衣兰油烯；34—α-香柠檬烯；35—δ-杜松烯

色谱柱：HP 5，25m×0.2mm，d_f=0.33μm　　载　气：N_2，1.2ml・min^{-1}

柱　温：70℃→110℃，2℃・min^{-1}→170℃，3℃・min^{-1}→250℃，7℃・min^{-1}　　检测器：FID

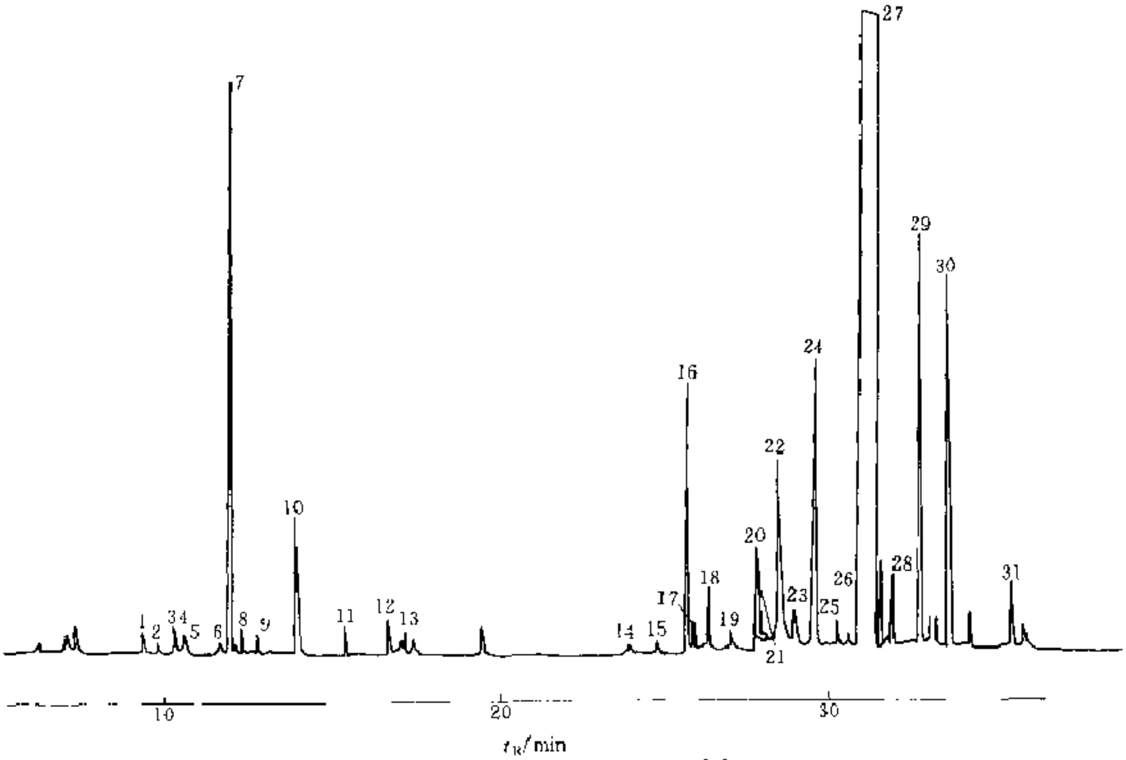


图 28-64 水菖蒲根茎挥发油[48]

色谱峰：1—α-蒎烯；2—莰烯；3—桧烯；4—β-蒎烯；5—月桂烯；6—α-松油烯；7—柠檬烯；8—反罗勒烯；9—γ-松油烯；10—芳樟烯；11—樟脑；12—4-松油醇；13—异茴香脑；14—甲基丁香酚；15—β-榄香烯；16—顺甲基异丁香酚；17—β-丁香烯；18—香树烯；19—α-葎草烯；20—6-表水菖蒲酮；21—2,6-二表水菖蒲酮；22—异水菖蒲酮；23—水菖蒲酮；24—γ-细辛醚；25—瑟林烯醇；26—顺异榄香素；27—β-细辛醚；28—反异榄香素；29—α-细辛醚；30—菖蒲烯酮异构体；31—异白菖蒲脑

色谱柱：甲基硅油，50m×0.25mm　　柱　温：80℃→230℃，4℃・min^{-1}　　载　气：N_2，20cm・s^{-1}　　检测器：FID

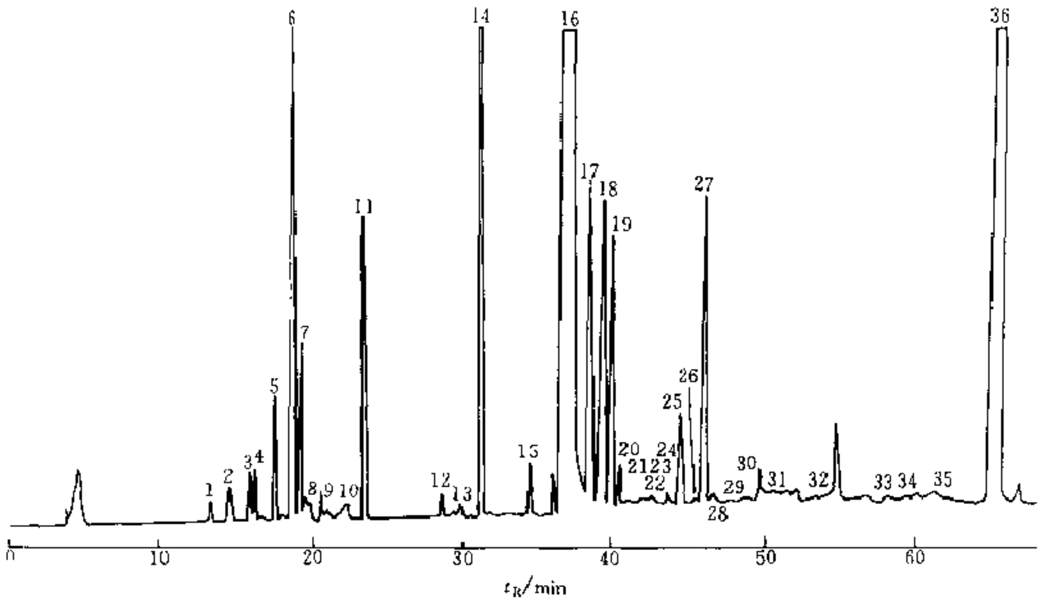


图 28-65　八角茴香挥发性成分[69]

色谱峰：1—α-蒎烯；2—莰烯；3—β-蒎烯；4—香叶烯；5—α-水芹烯；6—α-柠檬烯；7—Δ^3-蒈烯；8—桉叶素；9—4(10)侧柏烯；10—α-松油烯；11—芳樟醇；12—4-松油醇；13—α-松油醇；14—爱草脑；15—顺茴香醚；16—反茴香醚；17—茴香醛；18—α-佛手柑油烯；19—Z-β-金合欢烯；20—反石竹烯；21—对苯二醛；22—β-甜木药烯；23—α-葎草烯；24—3-甲氧基苯甲酸甲酯；25—β-芹子烯；26—α-玷玬烯；27—对甲氧基苯丙基酮-2；28—δ-毕澄茄烯；29—β-愈创木烯；30—γ-毕澄茄烯；31—榄香醇；32—甲基异丁香油酚；33—β-马啊里烯；34—胡萝卜次醇；35—雪松醇；36—对丙烯基苯基异戊烯醚

色谱柱：OV-17，50m×0.25mm
柱　温：70℃→160℃，3℃/min→190℃，1.5℃·min^{-1}
载　气：N_2
检测器：FID
气化室温度：220℃
检测器温度：220℃
进样方式：闪蒸法(裂解炉温度250℃，裂解时间45s)



色谱峰：1—α-蒎烯；2—β-蒎烯；3—β-香叶烯；4—α-水芹烯；5—柠檬烯；6—p-伞花烃；7—芳樟醇；8—β-石竹烯；9—草蒿脑；10—α-萜品醇；11—顺茴香脑；12—反茴香脑；13—茴香醛

色谱柱：Stabilwax，60m×0.25mm，d_f=0.25μm
柱　温：100℃(1min)→260℃，4℃·min^{-1}
载　气：He，30cm·s^{-1}
检测器：MS

图 28-66　中国八角茴香油[53]

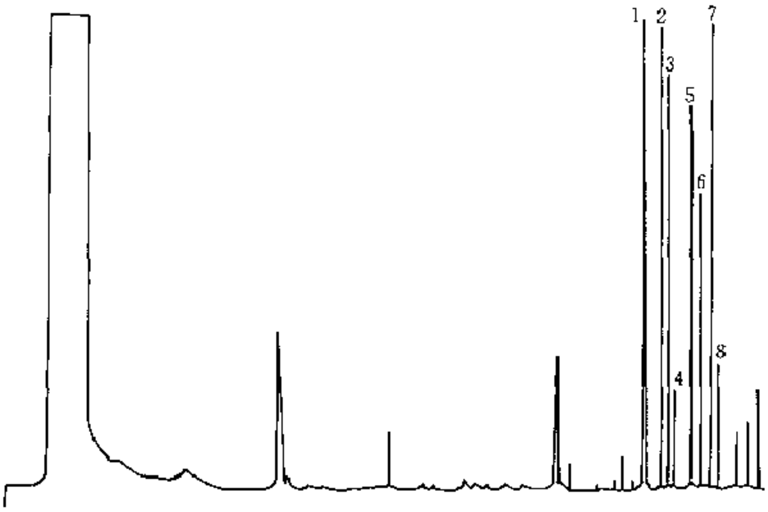


图 28-67 川芎挥发油[51]

色谱峰：1—丁基酞内酯；2—丁烯基酞内酯；3—内酯化合物；4—蛇床内酯；5—正丁基-4,5-二氢苯酞；6—新蛇床内酯；7—藁本内酯；8 内酯化合物

色谱柱：甲基硅氧烷，25m×0.2mm；d_f=0.33μm

柱 温：80℃(1min)→250℃(5min)，4℃·min⁻¹

载 气：He，1.3ml·min⁻¹

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：250℃

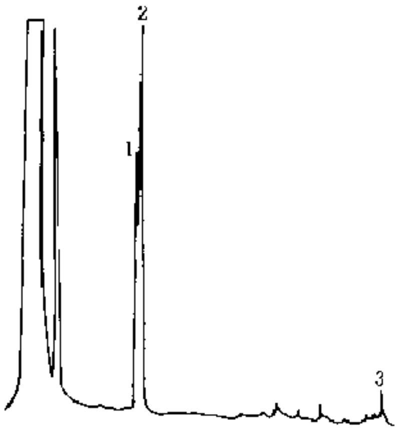


图 28-68 红灵散中冰片[52]

色谱峰：1—异龙脑；2—龙脑；3—麝香酮

色谱柱：SE-30，30m×0.25mm

柱 温：70℃(1min)→200℃（10min），7℃·min⁻¹

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：250°

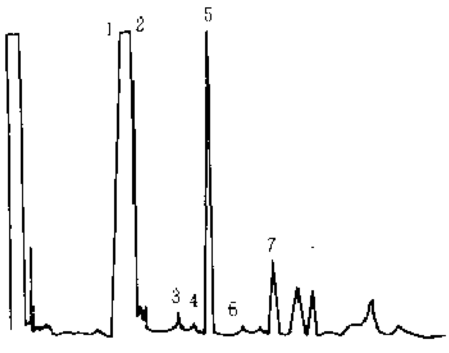


图 28-69 冠心苏合丸[53]

色谱峰：1—异龙脑；2—龙脑；3—α-檀香醇；4—β-檀香醇；5—苯甲酸苄酯；6—马兜铃酮；7—桂酸苄酯

色谱柱：HP 5，10m×0.53mm

柱 温：50℃→220℃（30min），4℃·min⁻¹

载 气：N_2，1ml·min⁻¹

检测器：FTIR

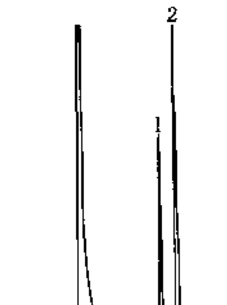


图 28-70 驱风苏合丸中冰片[54]

色谱峰：1—异龙脑；2—龙脑

色谱柱：Carbowax 20M-$BaCO_3$ 柱，45m×0.4mm

柱 温：140℃

载 气：H_2，50kPa

检测器：FID

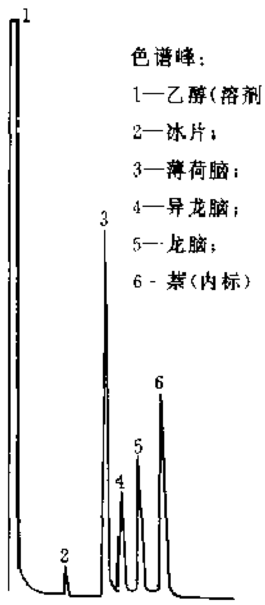


图 28-71 宫颈糜烂栓中薄荷脑和冰片[55]

色谱柱：10% PEG-20M，Chromosorb W AW（60 目～80 目），2.1m×2mm

柱 温：130℃

检测器：FID

气化室温度：200℃

检测器温度：200℃

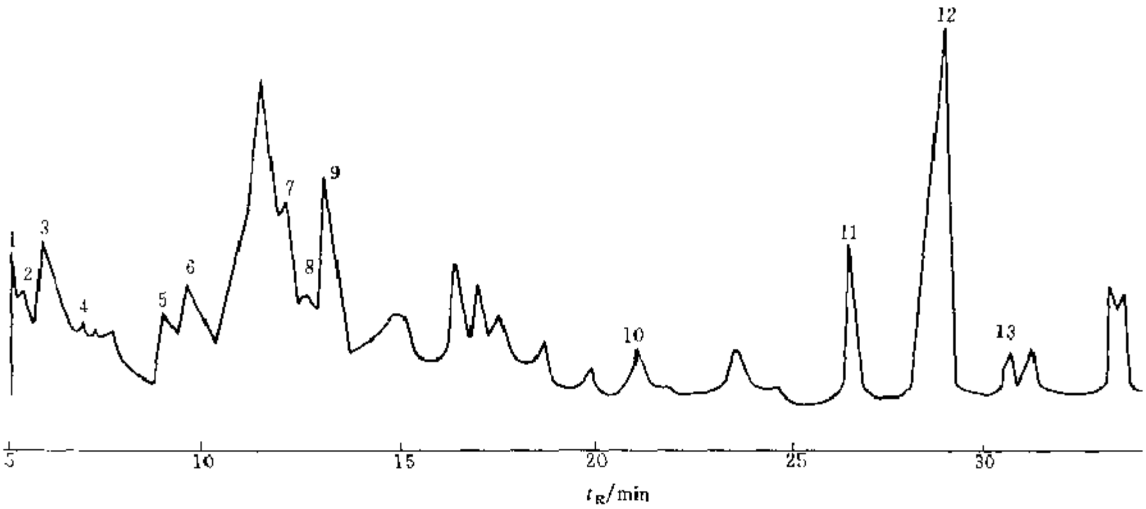


图 28-72 甘草挥发油[56]

色谱峰：1-正己醛；2—糠醛；3—正己醇；4—苯甲醛；5—芳环-α-二甲基苯乙烯；6—侧罗木醇；7 γ-松油醇；8—伞形花酮；9—百里酚；10—2,6-二叔丁基-4-甲基苯酚；11—丁烯基酸内酯；12，13—蒿苯内酯

色谱柱：Dexsil 300，50m×0.32mm　　检测器：MS

柱　温：90℃→230℃，3℃·min^{-1}　　气化室温度：280℃

载　气：He

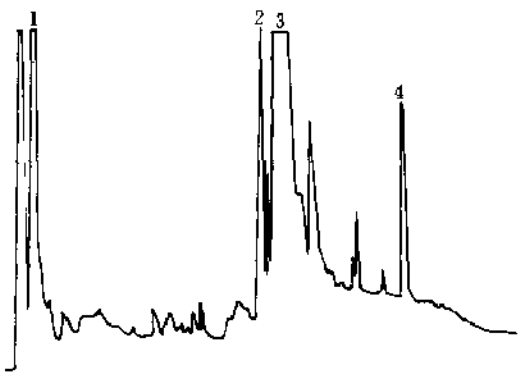


图 28 73　当归[37]

色谱峰：1 -2,5-二甲基呋喃；2 -丁烯基酸内酯；3—藁本内酯；4—10,13-二烯十八酸甲酯

色谱柱：Dexsil-300，20m×0.32mm

柱　温：70℃→200℃，3℃·min^{-1}→230℃，1℃·min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FID

闪蒸温度：裂解炉闪蒸温度为 250℃，时间 1.00min



图 28-74　中草药中锗(转化为锗化氢)[57]

色谱峰：1—锗

色谱柱：GDX-104（80 目～100 目），1.6m×2.5mm

柱　温：49℃

载　气：N_2，35ml·min^{-1}

检测器：FPD

检测器温度：120℃

参 考 文 献

1 郑立立，王磊，江克铮．分析化学，1994；22：383

2 方洪钜，胡秋．第四次全国色谱学术报告会文集，1983：262

3 Skinner R E，Gallaher E G，Predmore D B．Anal Chem，1973；45：571

4 SGE．Analytical Products 1993/1994 Catalogue，1994：58～62

5 Cailleux A，Turcant A，Premel-Cabic A，et al．J Chrom Sci，1981；19：163

6 Meneg J F, Berthou F, Picard D, et al. J Chromatogr, 1976; 129: 155
7 Darphy M J, Pandya M K, HRC & CC, 1983; 6; 317
8 冯翠玲，刘荫棠，罗毅．色谱，1994；12：180
9 J&W Scientific. 1994～1995 Chromatography Catalog & Reference Guide. 1995: 193～207
10 Volmut J, Melnik M, Matlsova E. HRC, 1993; 16: 27
11 Supelco. Catalog 18: 9
12 Supelco. Chromatography Catalog. 26: 14
13 霍秀敏，刘锋，罗毅．色谱，1994；12：53
14 李双庆，封世珍，王正巧等．全国第三届毛细管色谱报告会文集．1988：205
15 De Nijs R C M. Chrompack News. 1983; 10(3): 9
16 Lloyd H A, Fales H M, Highet P F, et al. JACS. 1960; 82: 3791
17 Seferovic W, Hinshaw J V, Jr, Effer L S. J Chrom Sci. 1986; 24: 374
18 Rasmussen K E. J Chromatogr. 1976; 120: 491
19 Gough T A, Baker P B. J Chrom Sci, 1981; 19: 227
20 Christoplerser A S, Rasmussen K E. J Chromatogr, 1979; 174: 454
21 Hewlett Packard. Application Note. GC3 73
22 胡绪英，刘锋，罗毅．第九次全国色谱学术报告会文集，1993；329
23 Blowberg L, Buijten J, Markides K, et al. J Chromatogr, 1983; 279: 9
24 Rushing L G, Gosnell A B, Holder C L, et al. HRC&CC, 1986; 9: 435
25 Hishta C, Mays P L, Garofalo M. Anal Chem, 1971; 43: 1530
26 Tsuji K, Robertson J H. Anal Chem, 1971; 43: 818
27 Fravolini A, Begliomini A. JAOAC, 1969; 52: 767
28 上海医药工业研究所中药分析研究室，上海市第七制药厂．分析化学，1976；4：385
29 贺良华，吕华冲．分析化学，1983；11：781
30 Santoro R, Warren R, Roberts G. J Chromatogr, 1976; 117: 375
31 Nikelly JG. Anal Chem, 1964; 36: 2248
32 Spencer G F, Plathner R D, Powell R Q. J Chromatogr, 1975; 120: 335
33 Szepesi G, Gazdag M. J Chromatogr. 1976; 122: 479
34 刘福清，吴月萍，邹本田，色谱，1991；9：64
35 Jayatilaka A, Poole C F. J Chromatogr. 1993; 617: 19
36 李庆民，张树和，戴杏梅．色谱．1994；12：224
37 陈耀祖，薛敦渊，李兆琳等，色谱，1985；2：148
38 沈祖惠，吴晓江，第十次全国色谱学术报告会文集．1995：204
39 方洪钜，余竞光，房其年等，色谱，1984；1：35
40 陈耀祖，薛敦渊，李兆琳等，色谱，1986；4：324
41 黄庆华，梁本恒，黄艺文，第六次全国色谱学术报告会文集，1987：165
42 吴桥，邱宁婴，陈玉书，分析化学，1989；17：697
43 张国彬，李兆琳，薛敦渊等，分析测试通报，1990；9(4)：1
44 黄慕斌，李倩倩，闫长泰，色谱，1991；9：384
45 程试青，吴惠勤，陈佃等，分析测试通报，1992；11(5)：10
46 于小兵，马熙中，丁欣．分析测试学报，1993；12(2)：8
47 方洪钜，段宠瑾，徐妍青等．色谱，1993；11：69
48 黄远征，何宗英，曹延怀等．色谱，1993；11：267
49 陈耀祖，李兆琳，薛敦渊等．分析化学，1986；14：853
50 Smith E don A, Frederick W Oehme. J Chrom Sci, 1993; 31: 291
51 李章万，张强．第九次全国色谱学术报告会文集，1993；195
52 吴桥，陈玉英，邱宁婴等．分析化学，1989；17：231

53 邱宁婴，何华、陈玉书等，分析化学，1995；23：273

54 张菌．分析测试学报，1996；15(5)：65

55 禹凤英，周桂生．第九次全国色谱学术报告会文集，1993；503

56 陈能煜，李兆琳，薛敦渊等．全国第二届毛细管色谱报告会文集，1984：341

57 范小振，丁天惠．色谱，1993；11：227

（李浩春　李全洪）

第二十九章　香料色谱图

第一节　植物香气色谱图

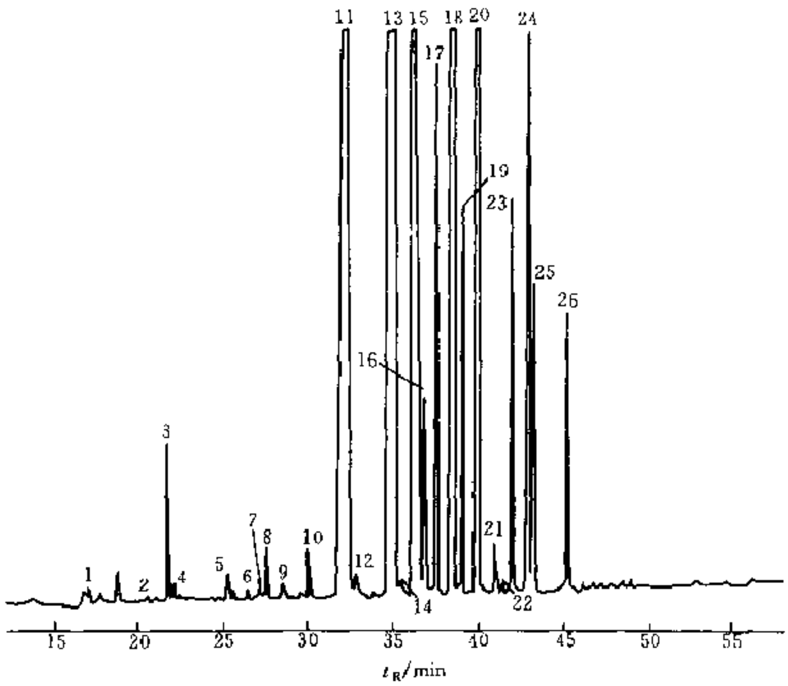


图 29-1　玫瑰头香[2]

色谱峰：1—1-己醇；2—香叶烯；3—γ-松油烯；4—冬青油烯水合物；5—百里酚；6—顺-玫瑰醚；7—反-玫瑰醚；8—芳樟醇；9—苯甲醇；10—香芳醛；11—苯乙醇；12—α,α,4-三甲基-3-环己烯-1-甲醇；13—β-香芳醇；14—橙花醇；15—牻牛儿醇；16—2-十一烷酮；17—牻牛儿醛；18—香茅醇乙酸酯；19—牻牛儿醇甲酸酯；20—牻牛儿醇乙酸酯；21—3,5-二甲基十三烷；22—香橙烯；23—丁子香酚；24—甲基丁子香酚；25—石竹烯；26—2 十三烷酮

色谱柱：OV-17，25m×0.20mm

柱　温：25°C（5min）→70°C，1min 内→220°C，3°C·min^{-1}

载　气：N_2，60ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250°C

检测器温度：250°C

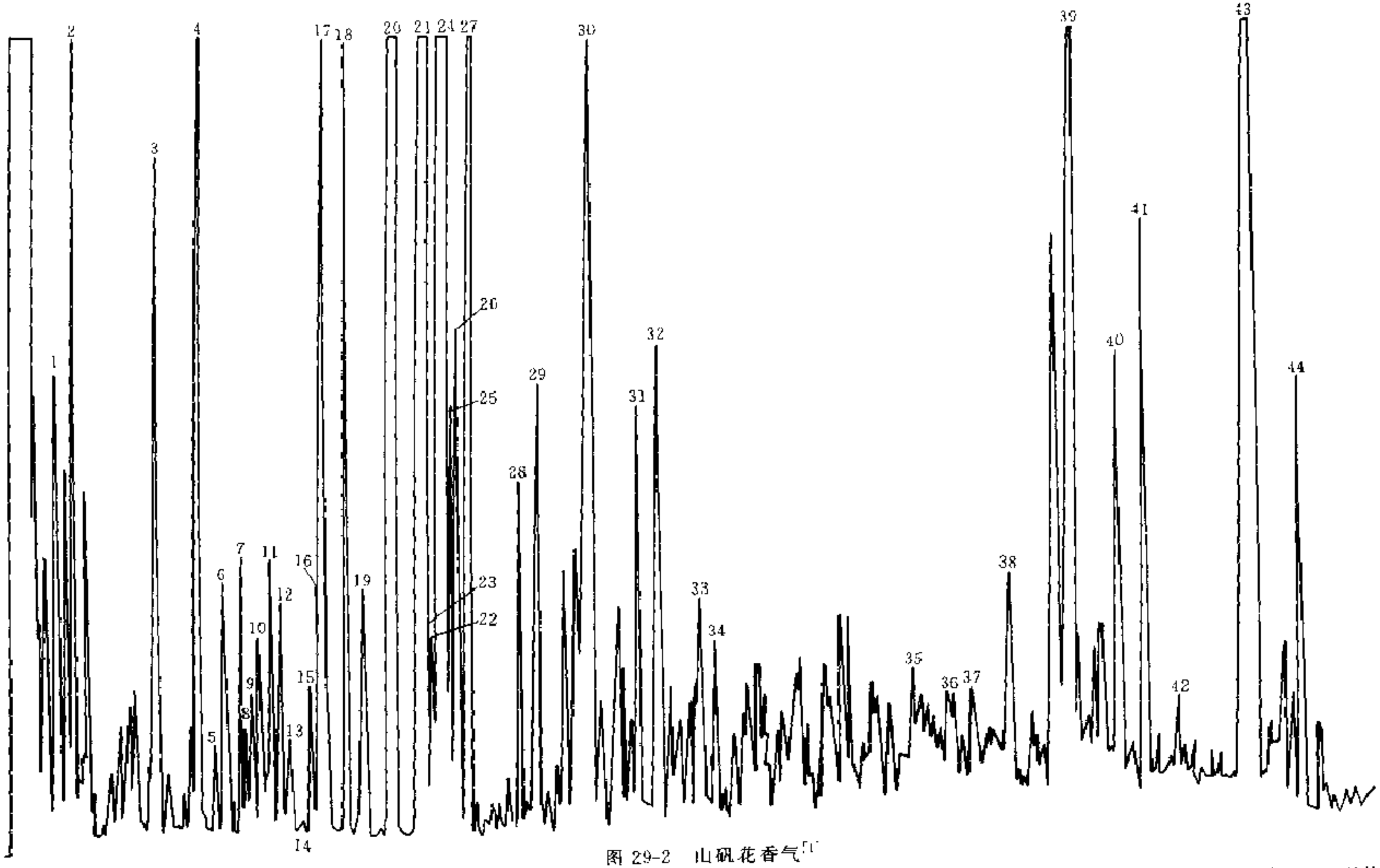


图 29-2　山矾花香气[1]

色谱峰：1—壬烷；2—乙烯基苯；3—环蒎烯；4—α-蒎烯；5—3-甲基环己醇；6—4-甲基-2-丙基戊醇；7—苯甲醛；8—甲基庚烯酮；9—β-松油烯；10—β-蒎烯；11—月桂烯；12—1-甲基乙烯基苯；13—癸烷；14—二甲基庚醇；15—乙酸叶醇酯；16—伞花烃；17—桉叶素；18—罗勒烯；19—松烯；20—反芳樟醇氧化物；21—顺芳樟醇氧化物；22—苯甲酸甲酯；23—十一烷；24—芳香醇；25—丁酸叶醇酯；26—二氢葛缕酮；27—紫苏烯；28—β-松油醇；29—乙基苯甲醇；30—芳樟醇氧化物；31—α-松油醇；32—双环(3,1,0)己烷 6-异丙二烯-1-甲基；33—香芹酮；34—乙基苯乙酮；35—苯甲酸；36，38—倍半萜；37—2-甲基-4-叔丁基苯酚；39—藜芦酸；40—二氢α-紫罗兰酮；41—二氢β-紫罗兰酮；42—α-紫罗兰酮；43—β-紫罗兰酮；44—4-甲基-2,6-二叔丁基苯酚

色谱柱：SE-54，30m　　柱　温：70℃→170℃，1℃・min⁻¹　　检测器：FID

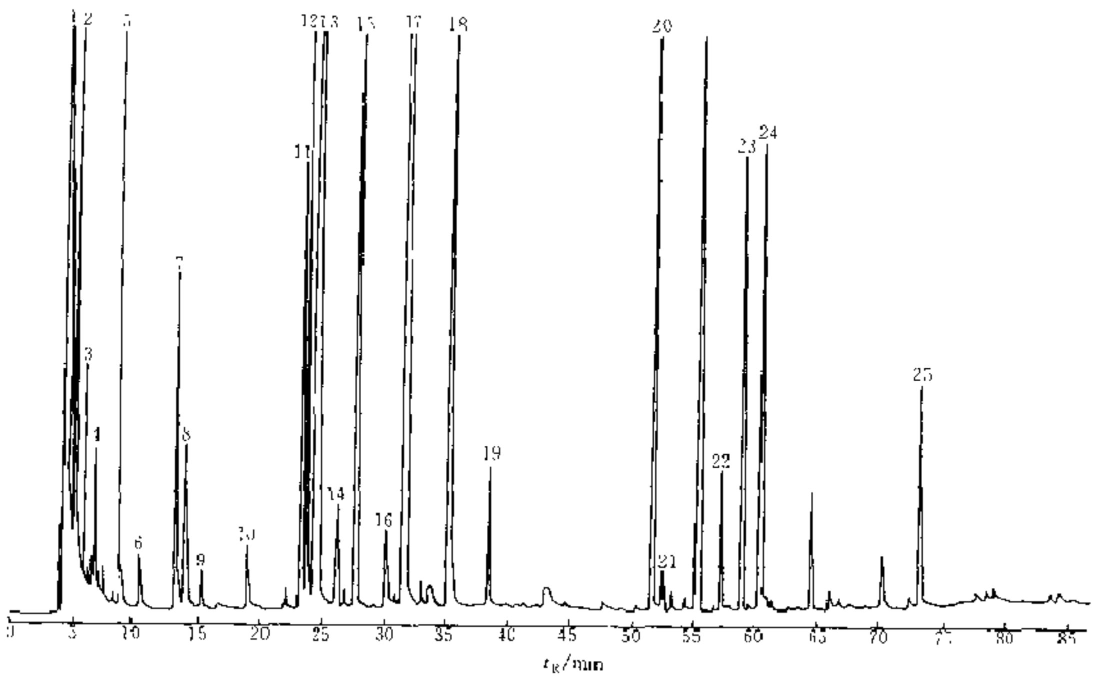
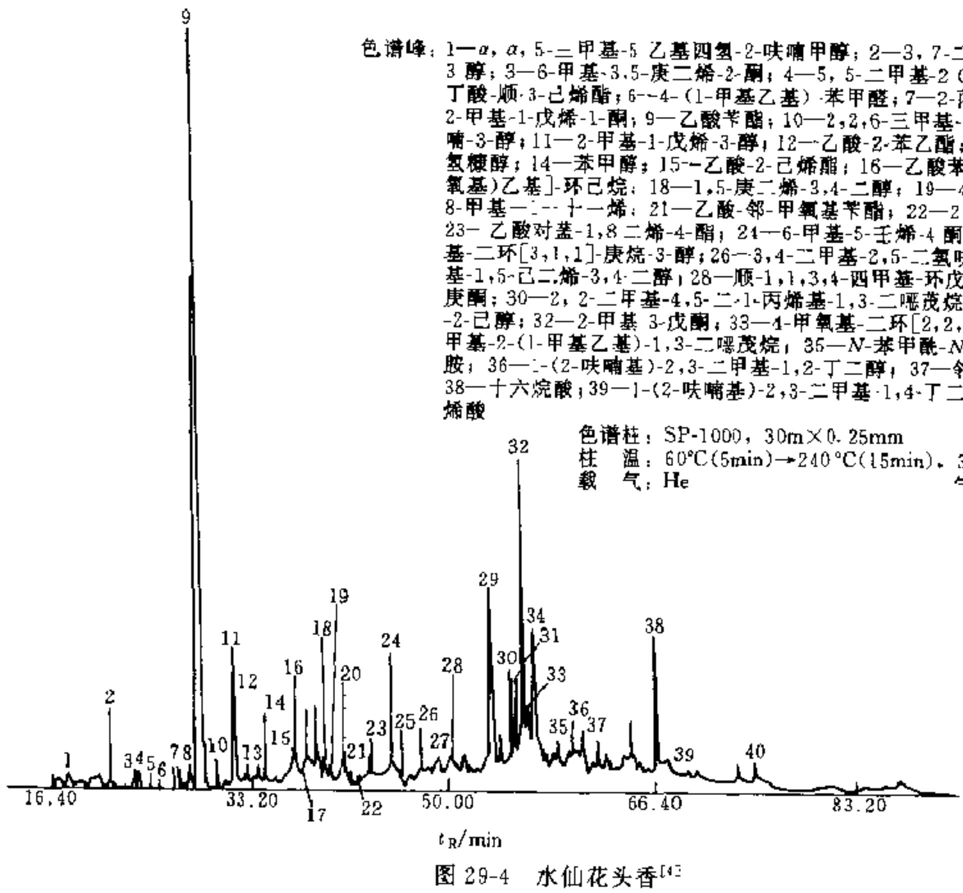


图 29-3 依兰鲜花头香[3]

色谱峰：1—乙醇；2—乙酸乙酯；3—羟基-2-丁酮；4—乙酸丙酯；5—甲苯；6—乙酸丁酯；7—邻二甲苯；8—对二甲苯；9—乙酸戊酯；10—α-蒎烯；11—香叶烯；12—3-己烯-1-醇-乙酸酯＋2-己烯-1-醇-乙酸酯＋3-己烯-1-醇；13—对甲基茴香醚＋苯甲醛；14—β-柠檬烯；15—罗勒烯；16—苯甲酸甲酯；17—芳樟醇；18—乙酸苯甲酯；19—对丙基茴香醚；20—乙酸香叶酯；21—异石竹烯；22—葎草烯；23—古芸烯；24—γ-榄香烯；25—苯甲酸-2-甲基苯酯

色谱柱：OV-101，35m×0.28mm　　柱　温：60°C(10min)→200°C(20min)，2°C·min^{-1}

载　气：N_2，16cm·s^{-1}　　检测器：FID　　气化室温度：220°C



色谱峰：1—α，α，5-三甲基-5 乙基四氢-2-呋喃甲醇；2—3，7-二甲基-1，6-辛二烯 3 醇；3—6-甲基-3，5-庚二烯-2-酮；4—5，5-二甲基-2（5H）-呋喃酮；5—丁酸-顺-3-己烯酯；6—4-（1-甲基乙基）-苯甲醛；7—2-丙基-1H-咪唑；8—2-甲基-1-戊烯-1-酮；9—乙酸苄酯；10—2，2，6-三甲基-6-乙基四氢-2H-吡喃-3-醇；11—2-甲基-1-戊烯-3-醇；12—乙酸-2-苯乙酯；13—顺-5-甲基-四氢糠醇；14—苯甲醇；15—乙酸-2-己烯酯；16—乙酸苯丙酯；17—[2-(戊氧基)乙基]-环己烷；18—1，5-庚二烯-3，4-二醇；19—4，9 癸二酮；20 8-甲基一-二-十一烯；21—乙酸-邻-甲氧基苄酯；22—2，5-二甲基-2-己醇；23—乙酸对盖-1，8 二烯-4-酯；24—6-甲基-5-壬烯-4 酮；25—2，6，6-三甲基-二环[3，1，1]-庚烷-3-醇；26—3，4-二甲基-2，5-二氢呋喃；27—2，5-二甲基-1，5-己二烯-3，4-二醇；28—顺-1，1，3，4-四甲基-环戊烷；29—3-甲基-4-庚酮；30—2，2-二甲基-4，5-二-1-丙烯基-1，3-二噁茂烷；31—2，5-二甲基-2-己醇；32—2-甲基 3-戊酮；33—4-甲氧基-二环[2，2，2]辛-2-酮；34—2 甲基-2-(1-甲基乙基)-1，3-二噁茂烷；35—N-苯甲酰-N-(苯基甲基)-苯酰胺；36—1-(2-呋喃基)-2，3-二甲基-1，2-丁二醇；37—邻苯二甲酸二丁酯；38—十六烷酸；39—1-(2-呋喃基)-2，3-二甲基-1，4-丁二醇；40—9-顺-十八烯酸

色谱柱：SP-1000，30m×0.25mm

柱　温：60°C(5min)→240°C(15min)，3°C·min^{-1}

载　气：He　　气化室温度：270°C

图 29-4 水仙花头香[4]

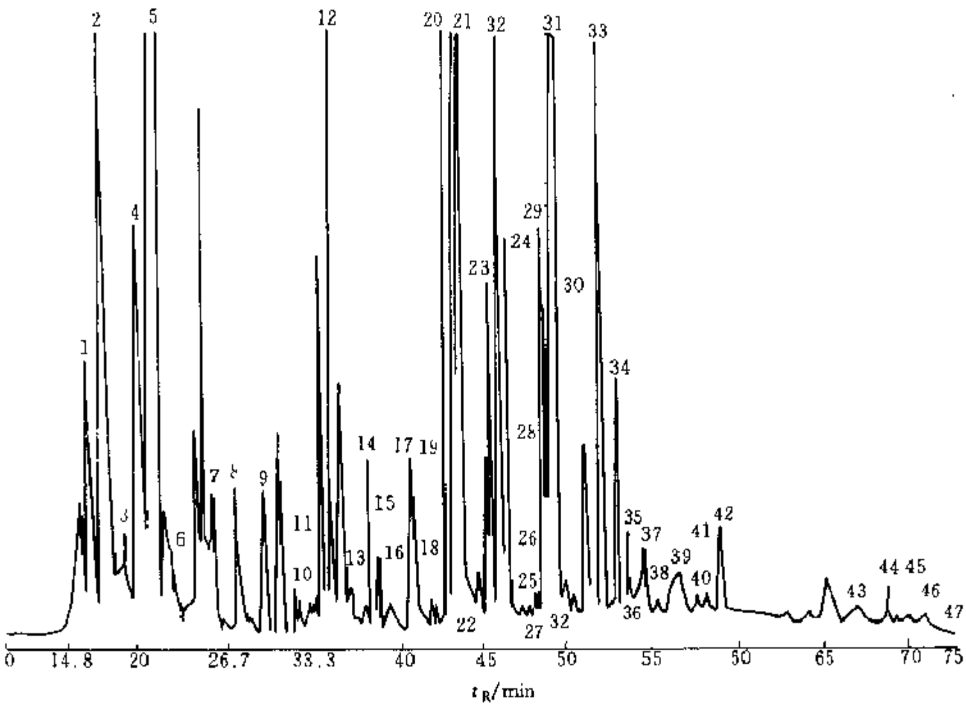


图 29-5　小花茉莉鲜花香气[5]

色谱峰：1—环氧丙烷；2—丙酮；3—甲酸乙酯；4—3-甲基丁醇；5—乙酸乙酯；6—正丁醇；7—乙酸丙酯；8—丁酸-2-丙烯酯；9—2,2,3-三甲基环氧丙烷；10—乙酸丁酯；11—乙酸-2-甲基-2-丙烯-1-酯；12—叶醇；13—二甲基二硫化物；14—乙酸-顺-2-甲基环戊酯；15—甲酸-顺-3-己烯酯；16—3-己烯酸甲酯；17—苯甲醛；18—苯酚；19—6-甲基-5-庚烯-2-酮；20—乙酸-顺-3-己烯酯；21—5-乙烯基-5-甲基-2(3*H*)-二氢呋喃酮；22—8-(1-甲基亚乙基)-双环[5,1,0]辛烷；23—苯甲醇；24—1-环丙基-2-丙酮；25—苯乙酮；26—甲酸苯甲酯；27—2,2-二甲基-3,4-戊二烯-1-醇；28—顺氧化芳香醇；29—苯甲酸甲酯；30—反氧化芳樟醇；31—芳樟醇；32—苯乙醇；33—乙酸苯甲酯；34—苯甲酸乙酯；35—氧化芳樟醇C；36—水杨酸甲酯；37—α-萜品醇；38—十二烷；39—橙花醇；40—橘牛儿醇；41—牛儿醇；42—$C_{16}H_{26}O$；43—草烯；44—α-石竹烯；45—β-马榄烯；46—γ-杜松烯；47—苯酸-顺-3-己烯酯

色谱柱：OV-101，50m×0.24mm　　检测器：FID

柱　温：40℃(5min)→200℃，3℃·min^{-1}　　气化室温度：270℃

载　气：N_2　　检测器温度：270℃

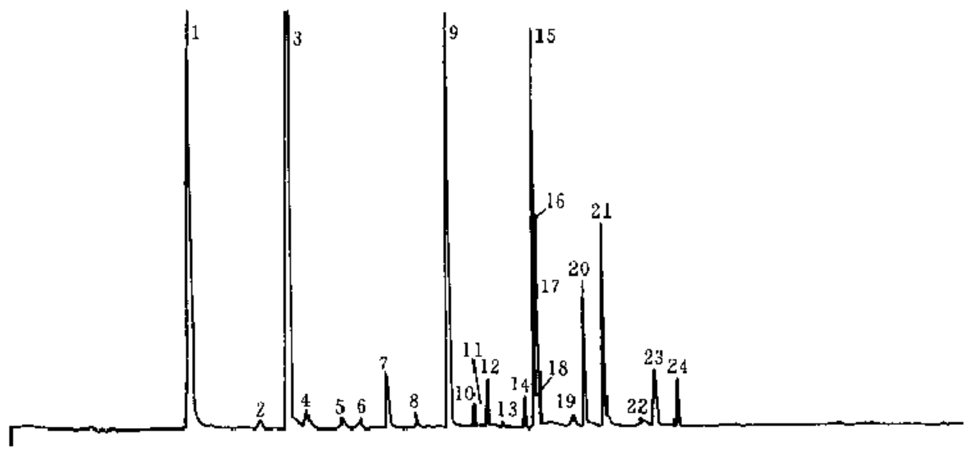


图 29-6　苹果中挥发性组分[8]

色谱峰：1—丁酸甲酯；2—异戊酸甲酯；3—丁酸己酯；4—乙酸丁酯；5—丁烯酸乙酯(?)；6—乙基-2-甲基丁酸酯；7—乙酸异戊酯；8—丁酸丙酯；9—乙酸甲酯；10—α-蒎烯；11—莰烯；12—丁酸仲丁酯；13—3-甲基丁基丙酸酯；14—β-蒎烯；15—丁酸丁酯；16—香叶烯；17—丙酸乙基-3-甲基酯；18—α-水芹烯；19—对伞花烃；20—苎烯；21—丁酸戊酯；22—(*Z*)-罗勒烯；23—(*E*)—罗勒烯；24—辛酸甲酯

色谱柱：BP-1，50m　　载　气：He，25cm·s^{-1}

柱　温：25℃→250℃，2℃·min^{-1}　　检测器：FID

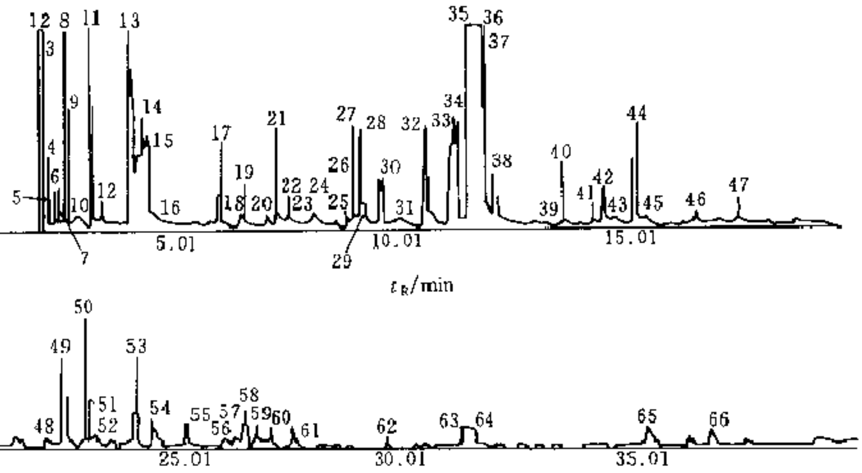


图 29-7 白玉兰花头香[6]

色谱峰：1—甲丙醚；2—2-丙醇；3—硫氰酸甲酯；4—2,2-二甲基-3-戊醇；5—2,4-二甲基-3-戊醇；6—3-甲基呋喃；7—1-甲基环戊烯；8—4-甲基-2-戊烯；9—*N*-甲基丙酰胺；10—1-甲氧基-2-甲基丁烷；11—吲哚；12—2-甲基环戊醇；13—5-甲基-1*H*-吲哚；14—丙酸乙酯；15—戊酸乙酯；16—6-庚炔酸甲酯；17—顺-罗勒烯；18—3,4-壬二烯；19—1,5-壬二烯；20—*β*-水芹烯；21—蒲勒烯；22—桧烯；23—*β*-蒎烯；24—顺十氢化萘；25—萜品油烯；26—邻-散花烃；27—莰烯；28—1,8-桉树脑；29—3-蒈烯；30—反罗勒烯；31—三环烯；32—顺-氧化里哪醇；33—顺对 2-芋烯-7-醇；34—反氧化里哪醇；35—1-戊基-1*H*-吡咯；36—3-戊基呋喃；37—L-薄荷醇；38—苯乙醇；39—反松香醇；40—顺蒎烷；41—顺马鞭烯酸；42—*β*-香芹烯；43—4-萜品醇；44—*α*-萜品醇；45—草蒿脑；46—桂醇；47—橙牛儿醇；48—*α*-毕澄茄烯；49—*α*-玷玴烯；50—*β*-杜桧烯；51—甲基-丁子香酚；52—*α*-檀香烯；53—香树烯；54—（*Z*）-顺-*α*-佛手烯；55—*α*-蛇麻烯；56—*β*-古芸烯；57—*α*-榄香烯；58—乙基-锡各酸苯酯；59—*β*-榄香烯；60—2-甲基-1-十二醇；61—氧化石竹烯；62—顺橙花叔醇；63—反橙花叔醇；64—十六醇；65—正十八烷；66—2-十八烯醛

色谱柱：DB 5，30m×0.24m，$d_f=0.25\mu m$　　载　气：He，2×10^5Pa　　进样方式：顶空进样

柱　温：80℃(5min)→200℃(10min)，4℃·min^{-1}　　检测器：离子阱检测器

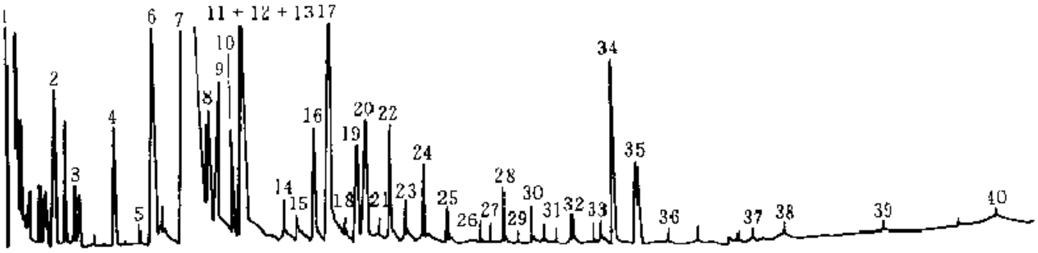
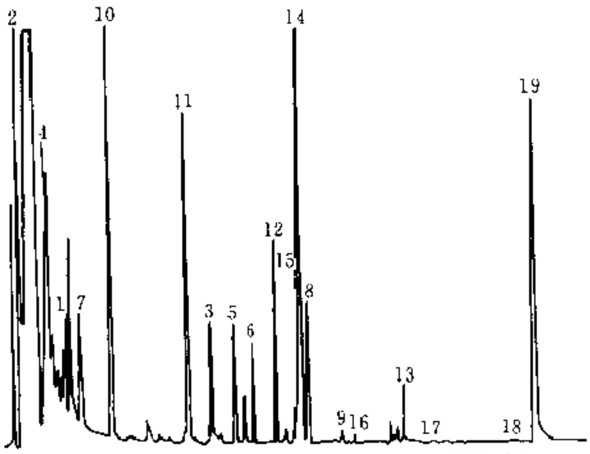


图 29-8 甜橙果肉香气[11]

色谱峰：1—乙醛；2—已烯醛；3—反-2-己烯-1-醇；4—*α*-蒎烯；5—桧烯；6—月桂烯；7—*α*-柠檬烯；8—*γ*-松油烯；9—反-芳樟醇氧化物；10—顺芳樟醇氧化物；11—芳樟醇；12—紫苏醛；13—香芹糅酮；14—*β*-松油醇；15—檀烯醇；16—松油烯-4-醇；17—*α*-松油醇；18—紫苏醇；19—反香芹醇；20—顺香芹醇；21—橙花醛；22—香叶醇；23—香叶醛；24—甲酸香叶酯；25—香叶酸甲酯；26—乙酸香茅酯；27—乙酸橙花酯；28—*α*-玷玴烯；29—*β*-荜澄茄烯；30—*n*-十二醛；31—*β*-石竹烯；32—*α*-古芸烯；33—*γ*-木罗烯；34—别-香树烯；35—*δ*-杜松烯；36—（*E*）-橙花叔醇；37—*α*-杜松醇；38—*β*-甜橙醛；39—诺卡酮；40—2-甲基二十烷

色谱柱：SE54，30m×0.24mm　　柱　温：60℃→200℃，3℃·min^{-1}



色谱峰：1—乙酸乙酯；2—乙醇；3—异丁酸乙酯；4—丙醇；5—丁酸乙酯；6—乙酸丁酯；7—己醛；8—乙酸戊酯；9—戊酸乙酯；10—丁醇；11—2-甲基-1-丁醇；12—反-2-己醛；13—乙酸己酯；14—己醇；15—反-2-己醇；16—苯醛；17—苯乙酮；18—4-甲氧基烯丙基苯；19—壬醇(内标物)

色谱柱：CP-Sil 5CB，25m×0.2mm

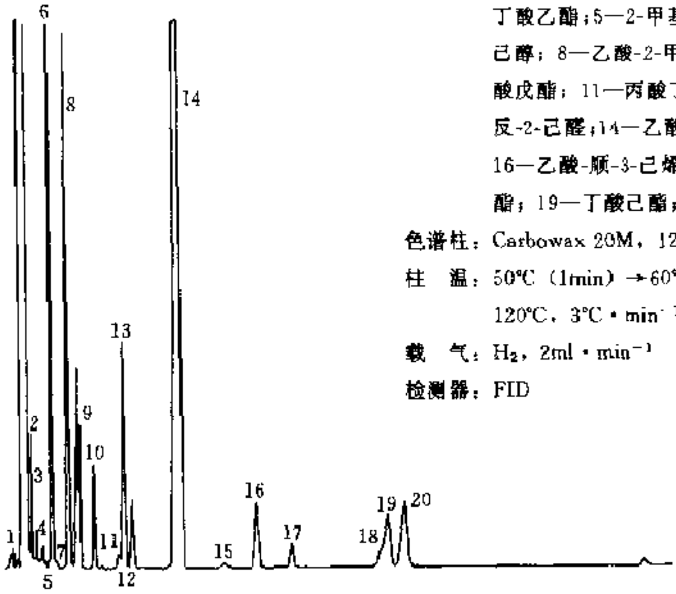
柱　温：58℃(10min)→165℃，1℃·min^{-1}

载　气：H_2，1ml·min^{-1}

气化室温度：240℃

检测器温度：280℃

图 29-9 苹果香气（一）[9]



色谱峰：1—乙醛；2—乙酸丙酯；3—乙酸-3-甲基丙酯；4—丁酸乙酯；5—2-甲基丁酸乙酯；6—乙酸丁酯；7—己醇；8—乙酸-2-甲基丁酯；9—1-丁醇；10—乙酸戊酯；11—丙酸丁酯；12—3-戊烯-2-醇；13—反-2-己醛；14—乙酸己酯；15—丁酸-3-甲基丁酯；16—乙酸-顺-3-己烯酯；17—1-己醇；18—己酸丁酯；19—丁酸己酯；20—2-甲基丁酸己酯

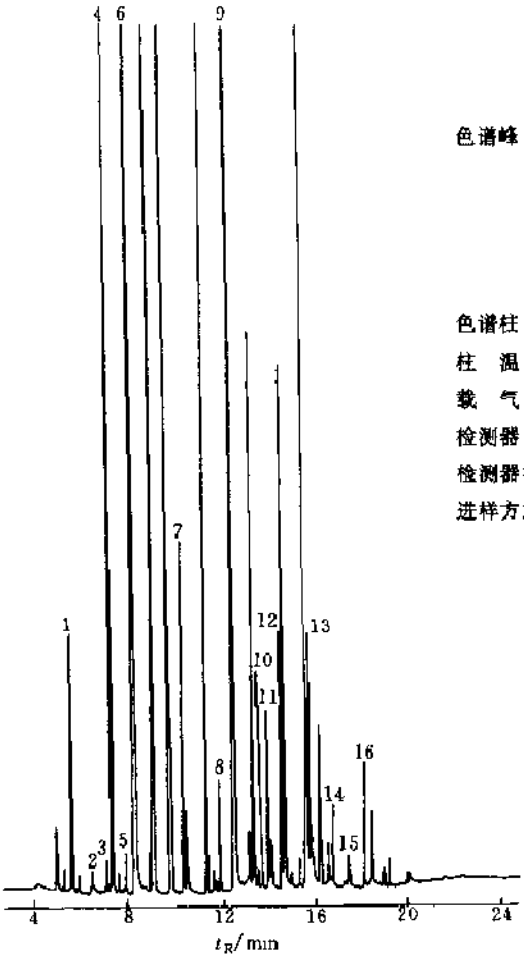
色谱柱：Carbowax 20M，12m×0.33mm，d_f=0.5μm

柱　温：50℃（1min）→60℃（1min），0.5℃・min^{-1}→120℃，3℃・min^{-1}

载　气：H_2，2ml・min^{-1}

检测器：FID

图 29-10　苹果香气（二）[10]



色谱峰：1—乙醛；2—丙酮；3—乙酸甲酯；4—乙酸乙酯；5—甲醇；6—乙醇；7—丁酸乙酯；8—异丁醇；9—乙酸异戊酯；10—乙酸正戊酯；11—己酸甲酯；12—异戊醇或反-2-己烯醛；13—乙酸己酯；14—乙酸-顺-3-己烯酯；15—己醇；16—辛酸甲酯或顺-3-己烯醇

色谱柱：CBJ-WAX，60m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱　温：50℃(5min)→200℃，10℃・min^{-1}

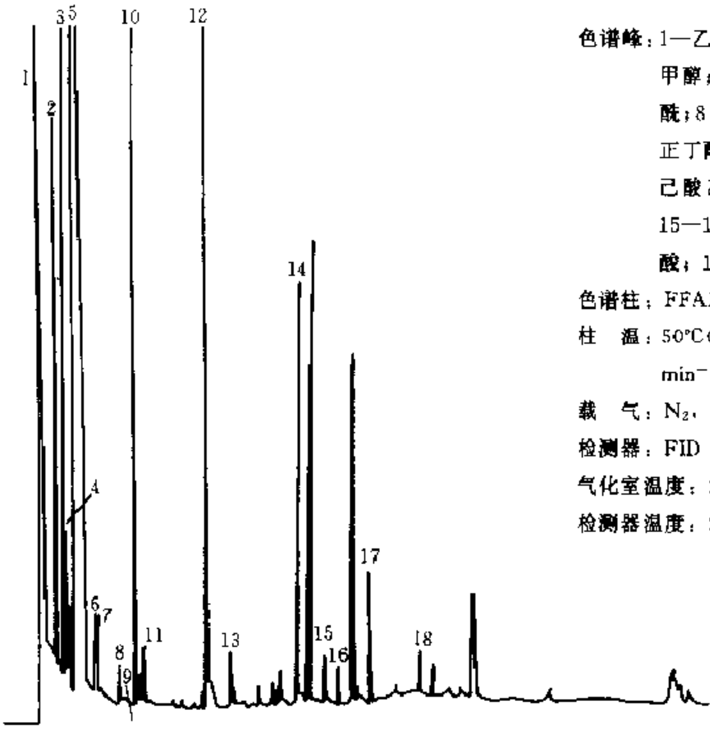
载　气：He，1ml・min^{-1}

检测器：FID

检测器温度：230℃

进样方式：顶空法

图 29-11　香蕉香气[7]



色谱峰：1—乙醛；2—丙酮；3—乙酸乙酯；4—甲醇；5—乙醇；6—仲丁醇；7—双乙酰；8—丁酸乙酯；9—丙醇；10—乙酸正丁酯（内标）；11—己酸甲酯；12—己酸乙酯；13—乙偶姻；14—乙酸；15—1，3-丁二醇；16—丙酸；17—丁酸；18—己酸

色谱柱：FFAP，50m×0.22mm

柱　温：50℃(10min)→200℃(30min)，5℃·min^{-1}

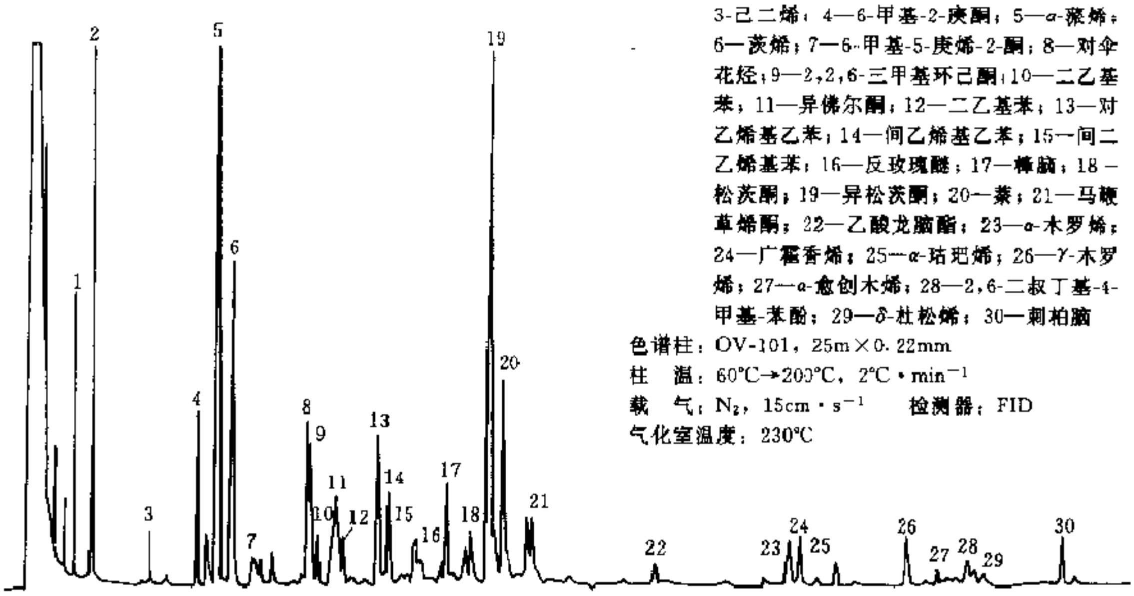
载　气：N_2，0.5ml·min^{-1}；分流比=50:1

检测器：FID

气化室温度：230℃

检测器温度：230℃

图 29-12　草莓挥发性成分[12]



色谱峰：1—乙缩醛；2—甲苯；3—2,3,5-三甲基-1,3-己二烯；4—6-甲基-2-庚酮；5—α-蒎烯；6—莰烯；7—6-甲基-5-庚烯-2-酮；8—对伞花烃；9—2,2,6-三甲基环己酮；10—二乙基苯；11—异佛尔酮；12—二乙基苯；13—对乙烯基乙苯；14—间乙烯基乙苯；15—间二乙烯基苯；16—反玫瑰醚；17—樟脑；18—松莰酮；19—异松莰酮；20—萘；21—马鞭草烯酮；22—乙酸龙脑酯；23—α-木罗烯；24—广藿香烯；25—α-玷玘烯；26—γ-木罗烯；27—α-愈创木烯；28—2,6-二叔丁基-4-甲基-苯酚；29—δ-杜松烯；30—刺柏脑

色谱柱：OV-101，25m×0.22mm

柱　温：60℃→200℃，2℃·min^{-1}

载　气：N_2，15cm·s^{-1}　　检测器：FID

气化室温度：230℃

图 29-13　赖百当头香[26]

第二节 精油与植物提取物色谱图

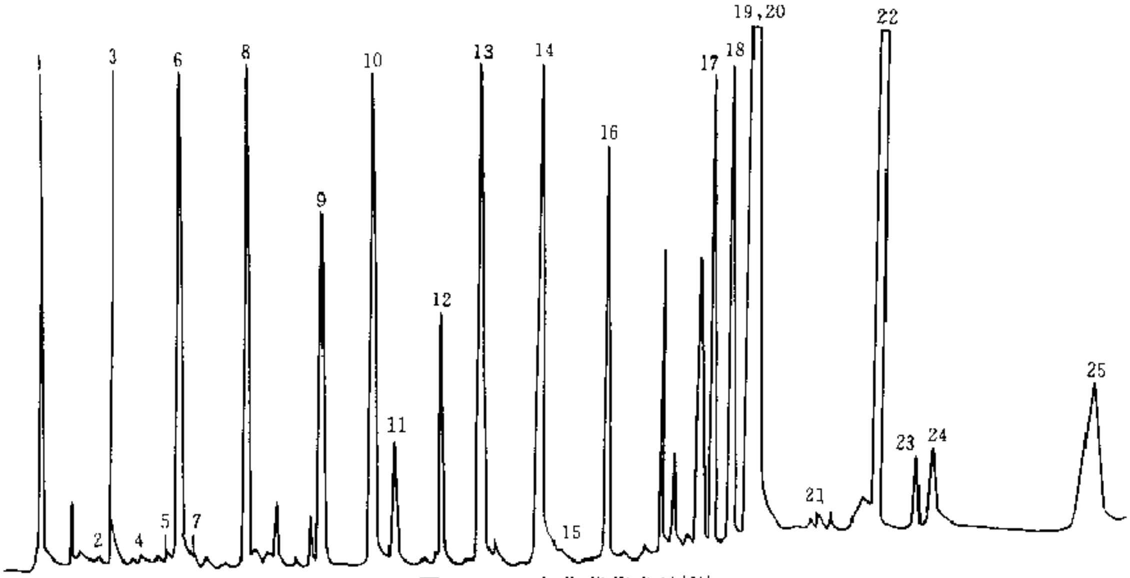


图 29-14 大花茉莉净油[14]

色谱峰：1—乙醇；2—正十六烷；3—芳樟醇；4—正十七烷；5—苯甲酸甲酯；6—金合欢烯；7—正十八烷；8—乙酸苄酯；9—苄醇；10—茉莉酮；11—正二十一烷；12—对甲苯酚；13—十六碳酸甲酯；14—异叶绿醇；15—正二十三烷；16—邻氨基苯甲酸甲酯；17—吲哚；18—反，反香叶基芳樟醇；19—叶绿醇；20—亚麻油酸甲酯；21—*N*-乙酰基-邻氨基苯甲酸甲酯；22—苯甲酸苄酯；23—邻苯二甲酸二丁酯；24—十六碳酸；25—角鲨油萜

色谱柱：二乙二醇丁二酸酯 SCOT 柱，50m×0.4mm　　载　气：He

柱　温：100℃(1min)→200℃，2℃·min^{-1}　　检测器：FID

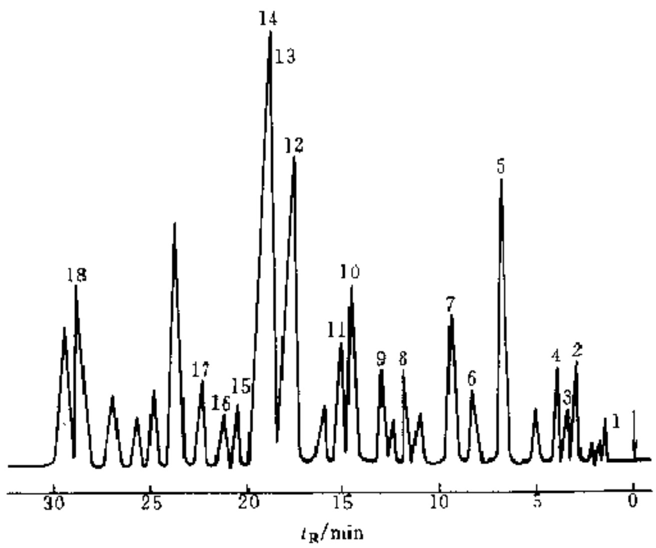


图 29-15 山苍子油（一）[17]

色谱峰：1—乙酸乙酯；2—α-蒎烯；3—莰烯；4—β-蒎烯；5—柠檬烯；6—对伞花烃；7—β-甲基庚烯酮；8—甲正庚基酮；9—香草醛；10—芳樟醇；11—α-异胡薄荷醇-a；12—柠檬醛-b；13—α-松油醇；14—柠檬醛-a；15—香草醇；16—香叶醇；17—黄樟油素；18—丁香酚

色谱柱：4% Carbowax 20M＋4% 有机皂土，102 担体(60 目～80 目)，1m×4mm

柱　温：50℃→190℃　　检测器：FID

载　气：N_2，45ml·min^{-1}　　气化室温度：210℃

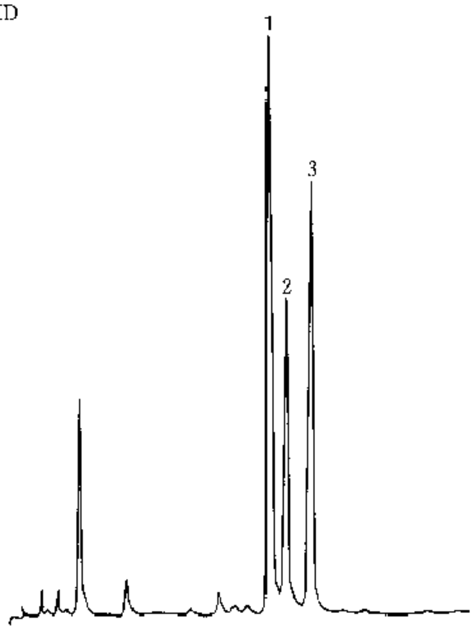


图 29-16 山苍子油（二）[18]

色谱峰：1—苯乙酮（内标）；2—橙花醛；3—香叶醛

色谱柱：5% Carbowax 20M，Chromosorb W AW-DMCS（60 目～80 目），3m×3mm

柱　温：80℃→180℃，2℃·min^{-1}

载　气：N_2，60ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：200℃

检测器温度：200℃

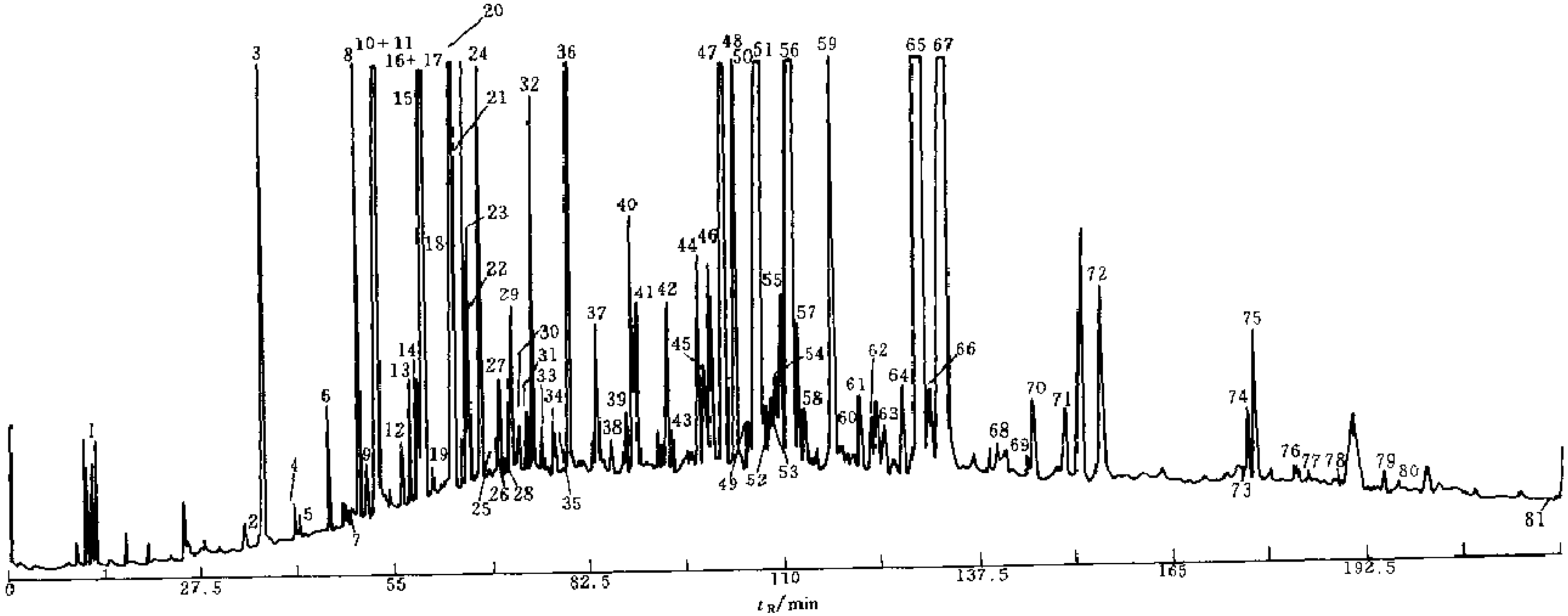


图 29-17 小花茉莉精油[15]

色谱峰：1—丙酮；2—乙酸-2-甲基-2-丙烯-1-酯；3—叶醇；4—1-(2-甲基-2-环戊烯-1-基)-乙酮；5—甲酸-顺-3-己烯酯；6—苯甲醛；7—6-甲基-5-庚烯-2-酮；8—乙酸-顺-3-己烯酯；9—2,3,5-三甲基-1,5-庚二烯；10—2,5-二甲基-1,5-己二烯-3,4-二醇；11—苯甲醇；12—甲酸苯甲酯；13—顺氧化芳樟醇；14—苯甲酸甲酯；15—反氧化芳樟醇；16—芳樟醇；17—苯乙醇；18—苯乙腈；19—1-壬炔；20—乙酸苯甲酯；21—苯甲酸乙酯；22—氧化芳樟醇 C；23—丁酸-顺-3-己烯酯；24—水杨酸甲酯；25—α-萜品醇；26—4-蒈烯；27—橙花醇；28—甲酸环己烯酯；29—牻牛儿醇；30—牻牛儿醛；31—水杨酸乙酯；32—萜烯醇；33—吲哚；34—2,6-二甲基喹啉；35—反-甲基-2-(丙烯基)环戊烷；36—邻氨基苯甲酸甲酯；37—α-荜澄茄烯；38—茉莉酮；39—甲基邻氨基苯甲酸甲酯；40—α-玷푸烯；41—β-榄香烯；42—β-石竹烯；43—(Z)-β-金合欢烯；44—α-葎草烯；45—α-香柠檬烯；46—γ-木罗烯；47—α-石竹烯；48—α-木罗烯；49—β-马榄烯；50—γ-杜松烯；51—β-红没药烯；52—δ-芹子烯；53—β-广藿香烯；54—白菖烯；55—N-(2-甲基-4-喹啉基)乙酰胺；56—苯酸-顺-3-己烯酯；57—苯甲酸己酯；58—苯酸-2-乙酰胺甲酯；59—斯巴醇；60—α-广藿香烯；61—愈创醇；62—1-氯-7-十七碳炔；63-倍半萜烯；64—α-杜松烯；65—榧烯醇；66—苯酸-2-羟基-1-甲基乙酯；67—3,8,8-三甲基-6-甲烯-1H-3A-7-亚甲基八氢甘菊环；68—3,7,11-三甲基-2,6,10-十二碳三烯-1-醇；69—六甲基-1,3,5-环壬三烯；70—苯酸-2,2-二甲基丙酯；71—2-十五碳炔-1-醇；72—苯甲酸苯甲酯；73—1,2,4-三乙基-5-甲基苯；74—2,3,4,5-四甲基三环[3,2,1,0,2,7]辛-3-烯；75—1,3,3-三甲基-2-(3-甲基-2-甲烯-3-亚丁烯基)环己醇；76—1,4-双(苯甲基)-2,3,5-三氧环[2,1,0]戊烷；77—4,4-二甲基-1-(2,7-辛二烯)环丁烯；78—乙酸-2-乙基-5-(1-甲基乙烯基)环乙酯；79—十六烷酸甲酯；80—棕榈酸；81—3,7,11-三甲基-2,6,10-十二碳三烯-1-醇

色谱柱：OV-101，50m×0.24mm

柱　温：(5min)→200℃

载　气：N_2

检测器：FID

气化室温度：270℃

检测器温度：270℃

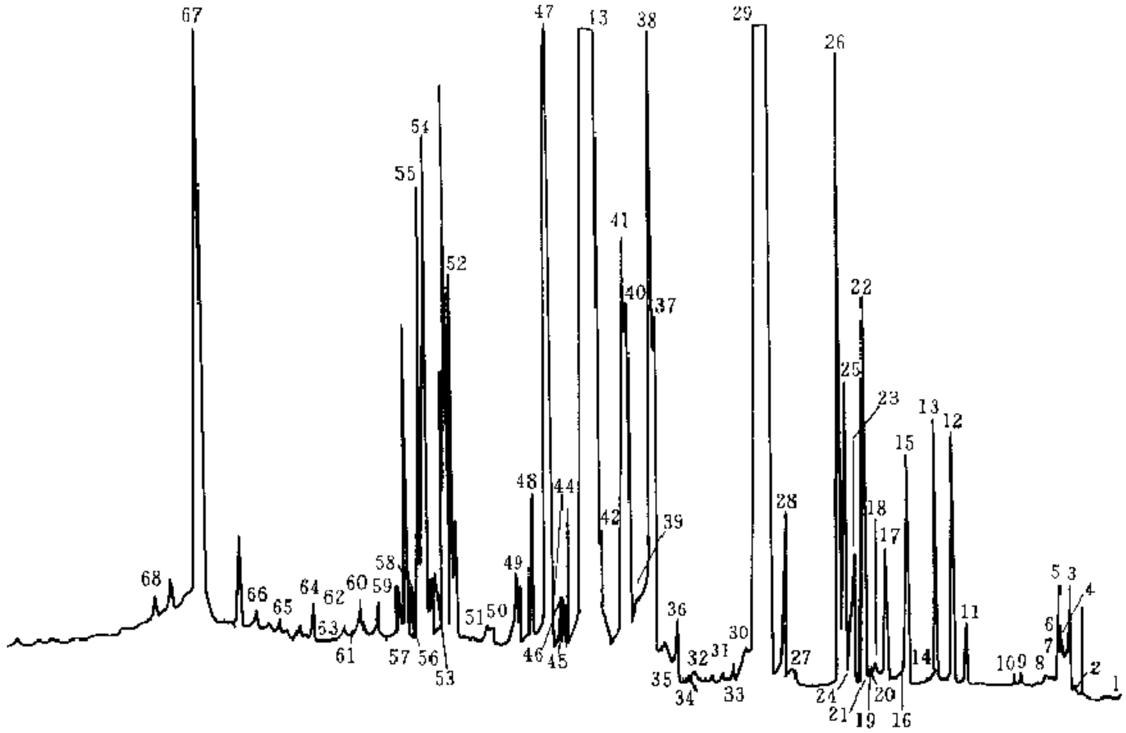


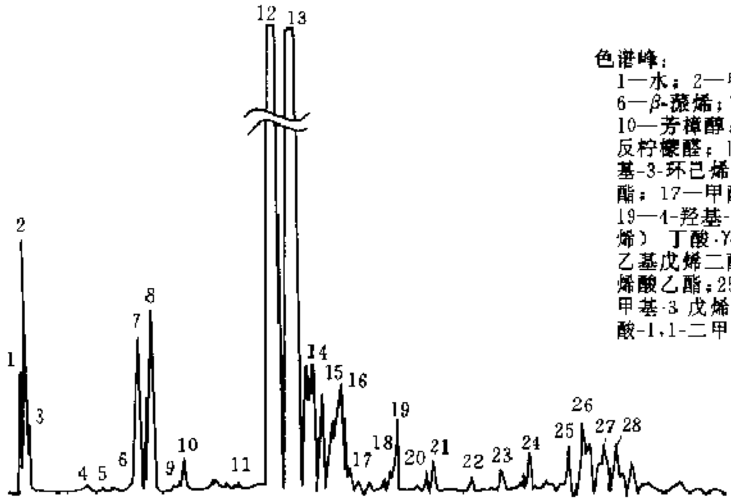
图 29-18 薰衣草油[16]

色谱峰：1—三环萜；2—乙醇；3—丙酮；4—2-甲基丙烯醛；5—2-甲基-3-丁烯-2-醇；6—甲基乙烯基酮；7—5-乙烯-2-酮；8—3,3-二甲基戊烷；9—甲基正丁基醚；10—乙酸正丁酯；11—γ-松油烯；12—α-蒎烯；13—莰烯；14—β-蒎烯；15—β-月桂烯；16—β-水芹烯；17—1-甲基-2-异丙苯；18—7-辛烯-4-醇；19—3-辛酮；20—2-辛烯-4-醇；21—3-蒈烯；22—乙酸正己酯；23—柠檬烯；24—罗勒烯；25—对伞花烃；26—1,8-桉叶素；27—1,4-桉叶素；28—里哪醇氧化物；29—里哪醇；30—α-萜品醇；31—茌油醇；32—4-甲基-3-庚烯-2-酮；33—薄勒酮；34—薰衣草醇；35—异丁酸正己酯；36—β-萜品醇；37—樟脑；38—4-萜品醇；39—龙脑；40—月桂烯醇；41—L-α-松油醇；42—橙花醇；43—乙酸芳樟酯；44—顺香苇醇；45—香叶醇；46—柠檬醛-b；47—乙酸薰衣草酯；48—乙酸龙脑酯；49—柠檬醛-α；50—胡椒酮；51—香柠檬烯；52—乙酸橙花酯；53—α-檀香烯；54—乙酸香叶酯；55—石竹烯；56—香树烯；57—乙酸薰衣草酯氧化物；58—β-红没药烯；59—(Z)-β-法呢烯；60—乙酸羟基里哪酯；61—α-姜黄烯；62—萜品二醇水合物；63—α-葎草烯；64—γ-杜松烯；65—α-感光檀香脑A；66—榄素；67—绿叶烷；68—δ-杜松烯

色谱柱：OV-17 SCOT 柱，39m×0.32mm　　柱　温：80℃→200℃，2℃·min^{-1}

载　气：N_2，16cm·s^{-1}　　检测器：FID

气化室温度：250℃　　检测器温度：240℃



色谱峰：

1—水；2—甲酸；3—乙酸；4—α-蒎烯；5—3-甲基噻吩；6—β-蒎烯；7—柠檬烯；8—3,7-辛二烯-2-酮；9—香草醛；10—芳樟醇；11—1-环己烯基乙酮；12—顺柠檬醛；13—反柠檬醛；14—3-甲醛环己烷基甲酸乙酯；15—2,5-亚甲基-3-环己烯甲酸；16—2-甲基-3-(1-环己烯)丙烯酸单甘酯；17—甲酸香茅醇酯；18—2,2-二甲基琥珀酸二乙酯；19—4-羟基-3-缬草酸；20—2-甲基-2-(2-甲基-3-氧-1-丁烯)丁酸-γ-内酯；21—乙酸冰片酯；22—5,5-二甲基-4-乙基戊烯二酸酐；23—癸酸-2-甲基烯丙酯；24—2-十二碳烯酸乙酯；25—十二碳酸-2-甲基烯丙酯；26—十二碳酸-4-甲基-3-戊烯酯；27—棕榈酸-3-甲基-2-丁烯酯；28—棕榈酸-1,1-二甲基-2-戊烯酯

图 29-19　山苍子核仁油[13]

色谱柱：HP-17，10m×0.53mm　　检测器：FTIR

柱　温：40℃(2min)→270℃，8℃·min^{-1}　　气化温度：300℃

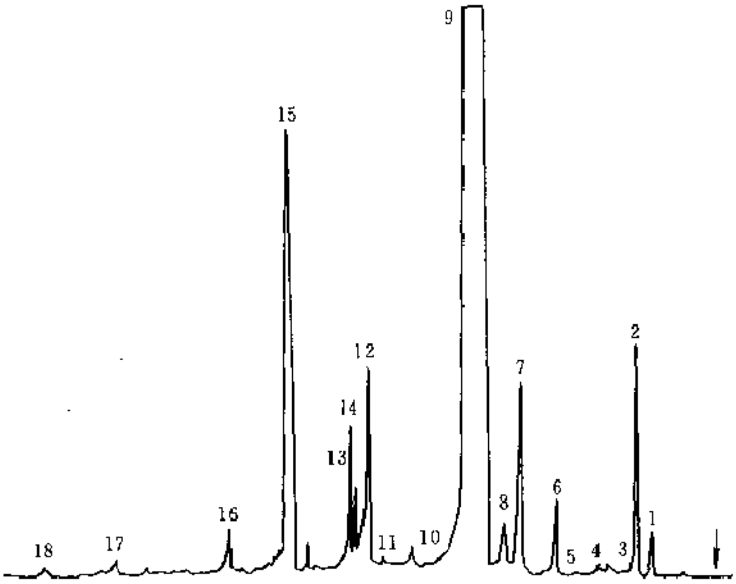


图 29-20　桂油[26]

色谱峰：1—乙烯基苯；2—苯甲醛；3—水杨醛；4　苯乙酮；5—苯乙醇；6—苯丙醛；7—顺肉桂醛；8—2-甲氧基苯甲醛；9—反-肉桂醛；10—桂醇；11—玷㸰烯；12—香豆素；13—乙酸肉桂酯；14—顺-2-甲氧基肉桂醛；15—反-2 甲氧基肉桂醛；16—乙酸-2-甲氧基内桂酯；17—苯甲酸苯甲酯；18—苯甲酸苯乙酯
色谱柱：OV-101SCOT 柱，30m×0.29mm
柱　温：100℃→230℃，1.5℃・min^{-1}　　检测器：FID　　气化室温度：240℃　　检测器温度：242℃

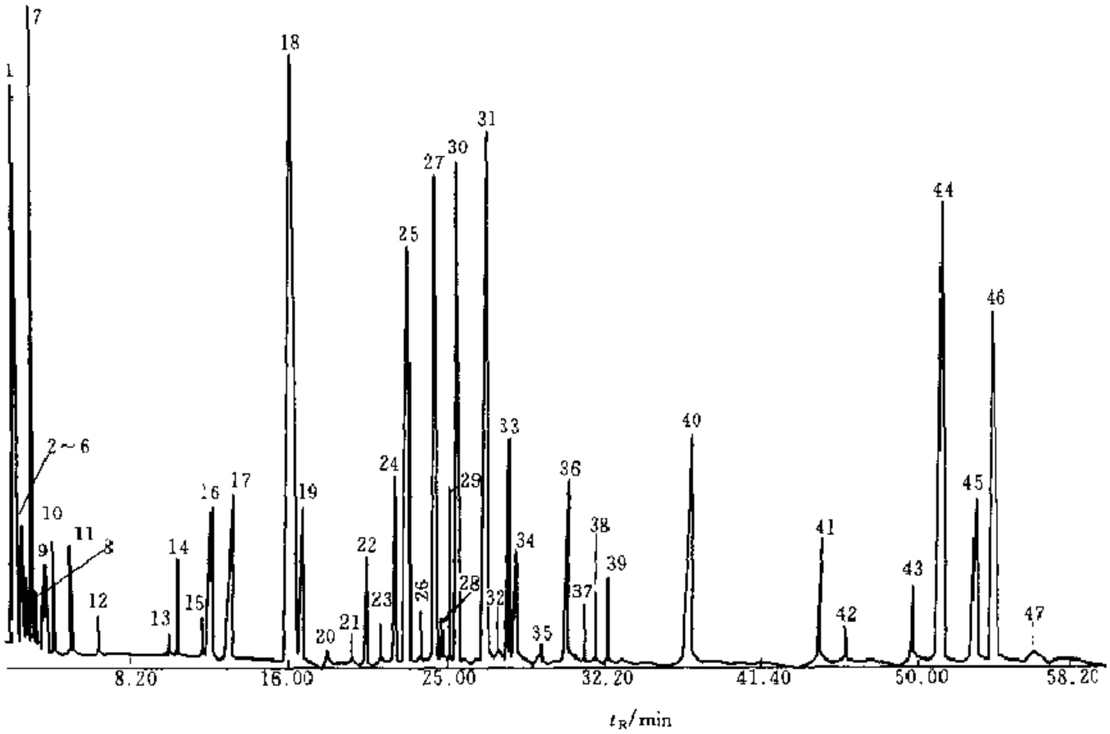


图 29-21　桔子皮油[21]

色谱峰：1—乙醇；2—乙酸乙酯；3—异丁醇；4—正丁醇；5—2-戊醇；6—β-香叶烯；7—柠檬烯；8—1,8-桉叶油素；9—戊醇；10—乙酸戊酯；11—环己酮；12—甲基庚烯酮；13—壬醛；14—氧化柠檬烯；15—庚醇；16—乙酸辛酯；17—癸醛；18—芳香醇；19—辛醇；20—乙酸壬酯；21—4 香芹蓋烯醇；22—2,6-二甲基-5-庚烯-1-醇；23—乙酸癸酯；24—乙酸香茅酯；25—壬醇；26—香叶醛；27—α-松油醇；28—香芹酮；29—橙花醛；30—顺乙酸香叶酯；31—反乙酸香叶酯；32—紫苏醛；33—癸醇；34—香茅醇；35—橙花醇；36—香芹烯醇；37—对-1,8(10)-盖二烯-9-醇；38—香叶醇；39—十二醇；40,46,47—未知物；41—苲油醇；42—辛酸；43—壬酸；44—百里香酚；45—癸酸
色谱柱：Carbowax 20M，30m　　柱　温：60℃(10min)→170℃，2℃・min^{-1}　　载　气：He　　检测器：MS

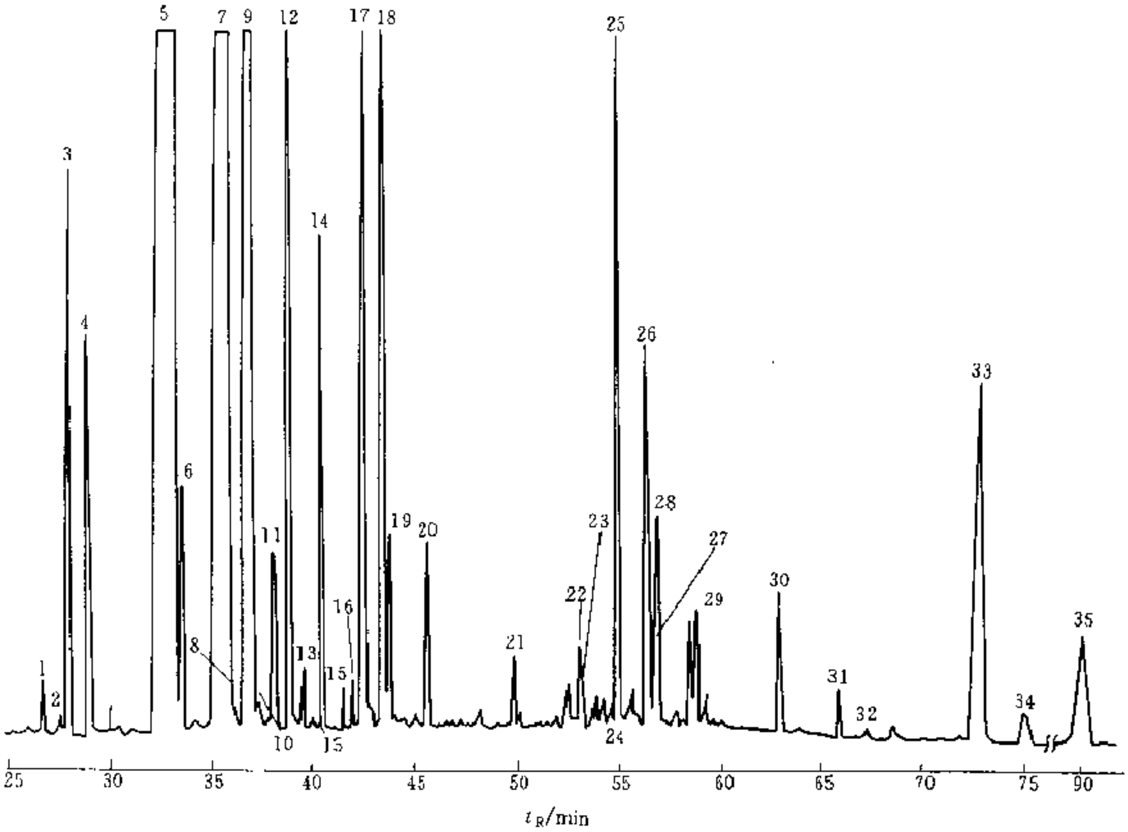


图 29-22　玫瑰精油[2]

色谱峰：1—顺玫瑰醚；2　反玫瑰醚；3—芳樟醇；4—苯甲醇；5—苯乙醇；6—α,α,4-三甲基-3-环己烯-1-甲醇；7—β-香茅醇；8—橙花醇；9—栊牛儿醇；10—2-十一烷酮；11—栊牛儿醛；12—乙酸香茅醇酯；13—甲酸栊牛儿醇酯；14—乙酸栊牛儿醇酯；15—2,5-二甲基十三烷；16—香橙烯；17—丁子香酚；18—甲基丁子香酚；19—石竹烯；20—十三烷酮；21—1,2,3-三甲氧基-5-（2-丙烯基）-苯；22—4,4a,5,6,7,8-六氢-4,4a-二甲基-6-(1 甲基乙烯基)-2-(3*H*)-萘酮；23- 3,6,8,8-四甲基-1*H*-3a,7-亚甲基八氢-6 奥醇；24—橙花叔醇；25—法尼醇；26—努特卡酮；27—9-十一烯-2-醇；28—去氢白菖蒲烯；29—榄香醇；30—二十一烷；31—1,2-苯二甲酸异丁酯；32—二十二烷；33—二十三烷；34—二十四烷；35—二十五烷

色谱柱：OV-17，25m×0.20mm

柱　温：25°C(5min)→70°C，1min 内→220°C，3°C・min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FID

气化室温度：250°C

检测器温度：250°C

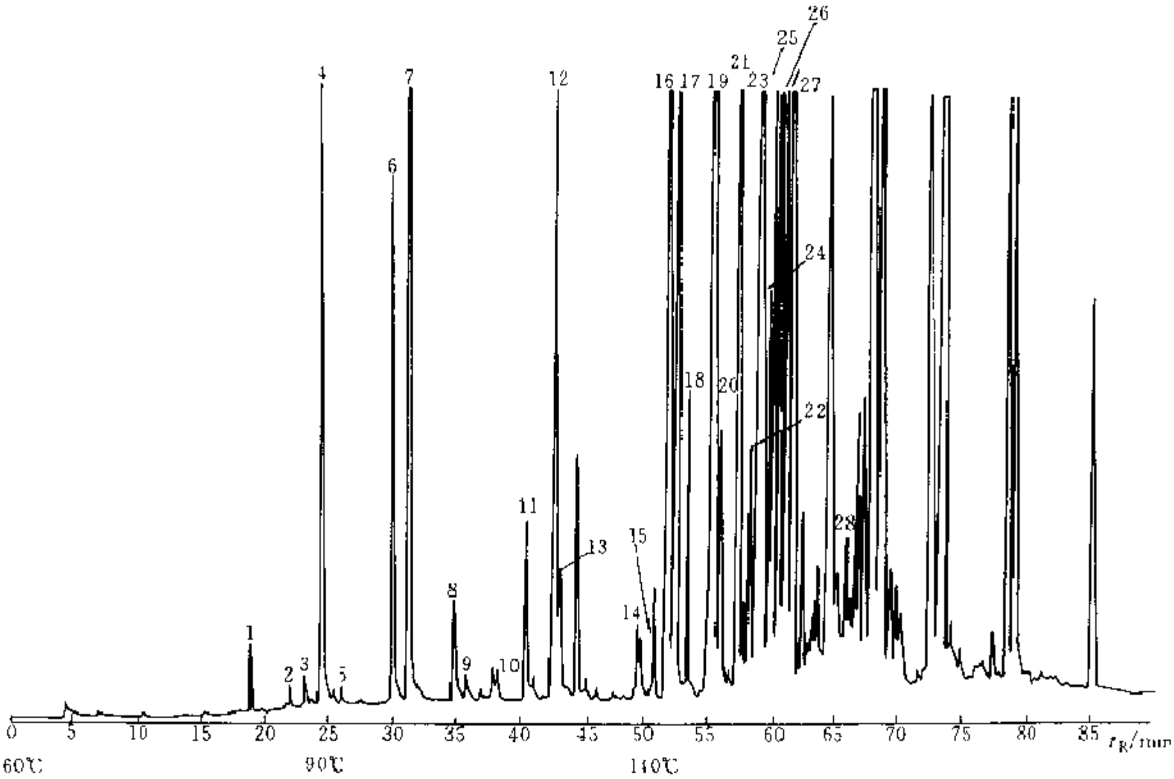


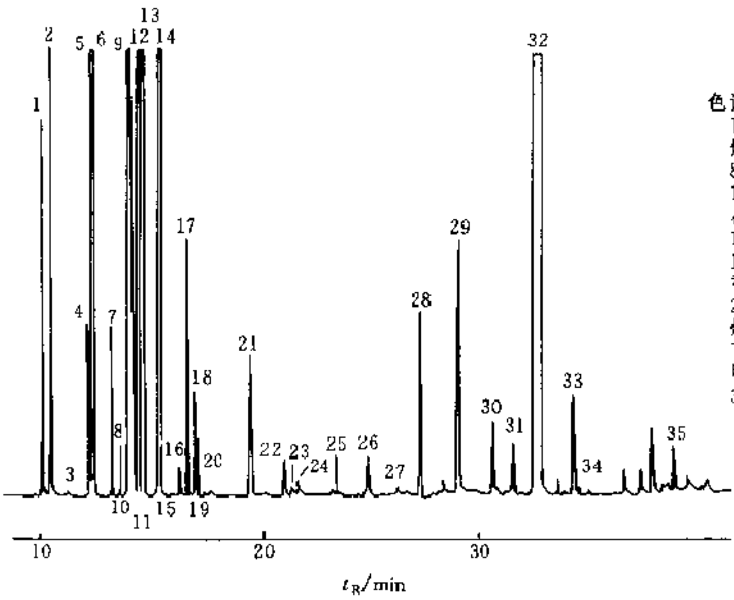
图 29-23 依兰花油[3]

色谱峰：1—α-蒎烯；2—6-甲基-5-庚烯-2-酮；3—香叶烯；4—对甲基茴香醚；5—β-柠檬烯；6—苯甲酸甲酯；7—芳樟醇；8—乙酸苯甲酯；9—苯甲酸乙酯；10—对丙基茴香醚；11—2,3-二甲基-5-甲氧基苯酚；12—香叶醇；13—香叶醛；14—丁子香酚；15—α-荜澄茄烯；16—乙酸香叶酯；17—1,2-二甲氧基-4-异丙烯基苯；18—β-荜澄茄烯；19—β-石竹烯；20—β-法尼烯；21—葎草烯；22—别香树烯；23—γ-木罗烯；24—α-木罗烯；25—β-红没药烯；26—δ-杜松烯；27—（—）-白菖烯；28—兰桉醇

色谱柱：OV-101，35m×0.28mm　　检测器：FID

柱　温：60℃（10min）→200℃（20min），2℃·min^{-1}　　气化室温度：220℃

载　气：N_2，16cm·s^{-1}

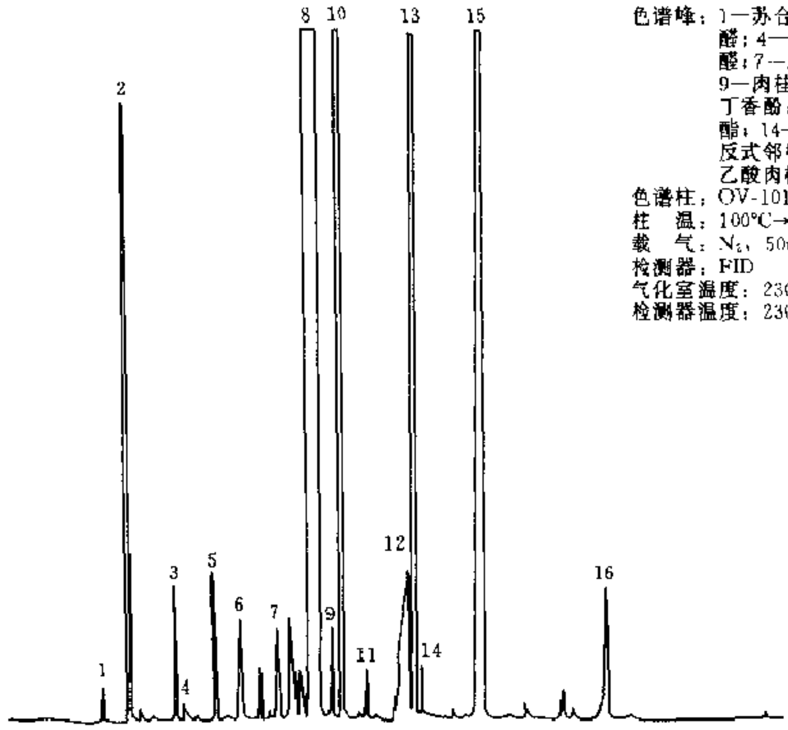


色谱峰：

1—α-侧柏烯；2—α-蒎烯；3—莰烯；4—香桧烯；5—月桂烯；6—β-蒎烯；7—α-水芹烯；8—α-松油烯；9—柠檬烯；10—顺-α-罗勒烯；11—β-水芹烯；12—反-β-罗勒烯；13—对伞花烃；14—γ-松油烯；15—顺芳樟醇氧化物；16—正辛醇；17—α-异松油烯；18—芳樟醇；19—正壬醛；20—1,3-二甲基苯乙烯；21—香茅醛；22—4-松油醇+癸醛；23—冰片；24—α-松油醇；25—乙酸芳香酯；26—δ-榄香烯；27—百里香酚；28—β-榄香烯；29—β-丁香烯；30—α-草烯；31—γ-木罗烯；32—N-甲基邻氨基+苯甲酸甲酯；33—橙花叔醇；34—β-榄香醇；35—β-桉叶醇

图 29-24 罗汉橙叶精油[22]

色谱柱：OV-17，50m×0.25mm　　柱　温：70℃→230℃，4℃·min^{-1}



色谱峰：1—苏合香烯；2—苯甲醛；3—水杨醛；4—苯乙酮；5—苯乙醇；6—苯乙醛；7—顺式肉桂醛；8—反式肉桂醛；9—肉桂醇；10—十三烷（内标）；11—丁香酚；12—香豆素；13—乙酸肉桂酯；14—顺式邻甲氧基肉桂醛；15—反式邻甲氧基肉桂醛；16—邻甲氧基乙酸肉桂酯

色谱柱：OV-101，50m×0.2mm

柱　温：100℃→200℃，3℃·min^{-1}

载　气：N_2，50ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：230℃

检测器温度：230℃

图 29-25　肉桂油[18]

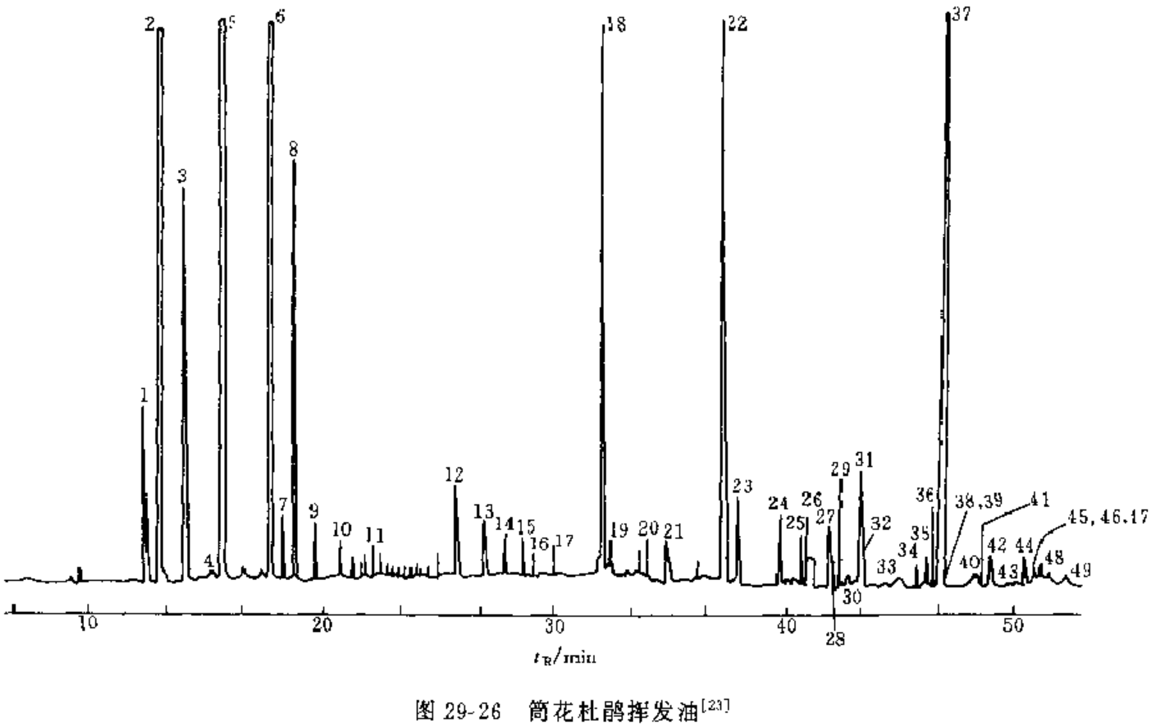


图 29-26　筒花杜鹃挥发油[23]

色谱峰：1—α-守烯；2—α-蒎烯；3—莰烯；4—桧烯；5—β-蒎烯；6—香叶烯；7—对伞花烃；8—柠檬烯；9—γ-松油烯；10—芳香醇；11—香茅醇；12—松香芹醇；13—冰片；14—4-松油醇；15—α-松油醇；16—月桂醇；17—乙酸芳樟酯；18—乙酸冰片酯；19—α-玷吧烯；20—α 荜澄茄烯；21—β-香柠檬烯；22—β-石竹烯；23—α 古芸烯；24—α 香柠檬烯；25—α 檀香烯；26—葎草烯；27—β 古芸烯；28—β-芹子烯；29—菖蒲二烯；30—香木兰烯；31—愈创木醇；32—α-毛罗烯；33—β-红没药烯；34—γ-杜松烯；35—δ-杜松烯；36—反-β-法尼烯；37—檀香醇；38—1-葎草醇；39—1（2*H*）萘酮；40—α-柏木烯；41—2（1*H*）萘酮；42—异醋酸冰片酯；43—γ-芹子烯；44—β-桉叶油醇；45—α-杜松烯；46—1 香树烯；47—α-斯潘连醇；48—异菖蒲二醇；49—桧脑

色谱柱：OV-101，50m×0.25mm　　柱　温：70℃→230℃，4℃·min^{-1}

载　气：N_2，20cm·s^{-1}；分流比＝80∶1　　检测器：FID

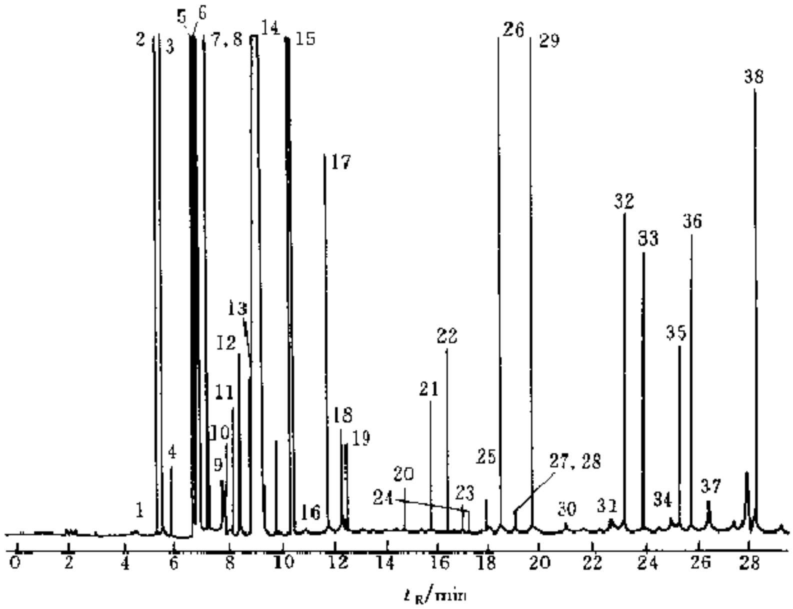


图 29-27　柠檬油[19]

色谱峰：1　庚醇；2—α-苧烯；3—α-蒎烯；4—莰烯；5—桧烯；6—β-蒎烯；7—6-甲基-5-庚烯-2-酮；8—香叶烯；9—辛醛；10—α-水芹烯；11—3-蒈烯；12—α-萜品烯；13—对伞花烃；14—柠檬烯；15—γ-萜品烯；16—辛醇；17—萜品油烯；18　芳香醇；19—壬醛；20—香芳醛；21—萜品烯-4-醇；22　α-萜基醇；23—癸醛；24—乙酸辛酯；25—橙花醇；26—橙花醛；27—香芹酮；28—牻牛儿醇；29—牻牛儿醛；30—乙酸壬酯；31—乙酸香芳酯；32—乙酸橙花酯；33—乙酸牻牛儿酯；34—十二醛；35—石竹烯；36—反-α-香柠檬烯；37—α-葎草烯；38—β-红没药烯

色谱柱：SE 54，30m×0.25mm，d_f=0.25μm　　柱　温：75℃(8℃·min^{-1})→200℃(4min)，4℃·min^{-1}

载　气：He，25cm·s^{-1}　　检测器：FID

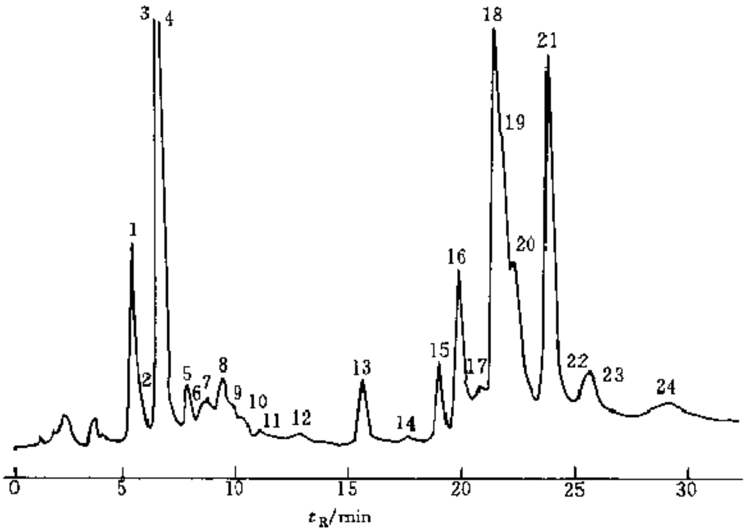


图 29-28　松叶油[24]

色谱峰：1—α-蒎烯；2—莰烯；3—β-蒎烯；4—香叶烯；5—3-蒈烯；6—C_{10}烃；7—对伞花烃；8—苎烯；9—β-水芹烯；10—萜品油烯；11—C_{10}醇；12—α-萜品醇；13—乙酸橙花酯；14—乙酸牻牛儿酯；15—C_{15}烃；16—石竹烯；17—葎草烯；18—γ-木罗烯；19—β-红没药烯；20—δ-杜松烯；21—α-红没药烯；22—α-杜松醇；23—δ-杜松醇；24—C_{15}醇

色谱柱：10%SP-2100，Supelcoport（80目～100目），1.84m×2mm

柱　温：75℃→200℃，4℃·min^{-1}

载　气：He，20ml·min^{-1}

检测器：FID

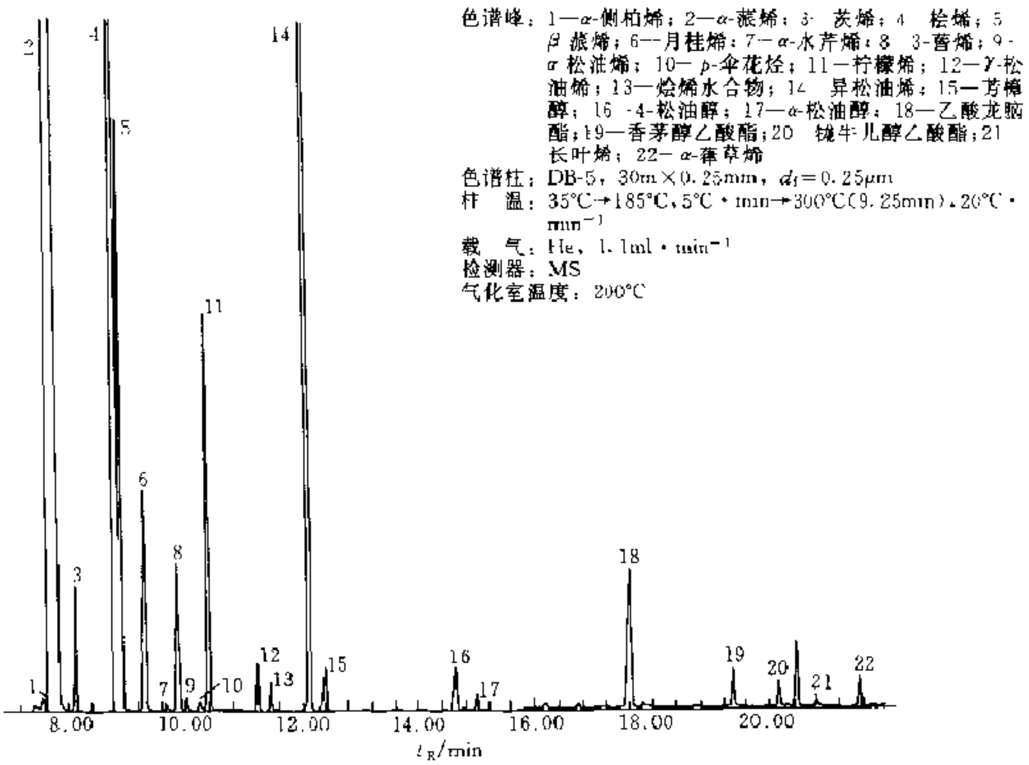


图 29-29　冷杉边材萃取液中萜品油[25]

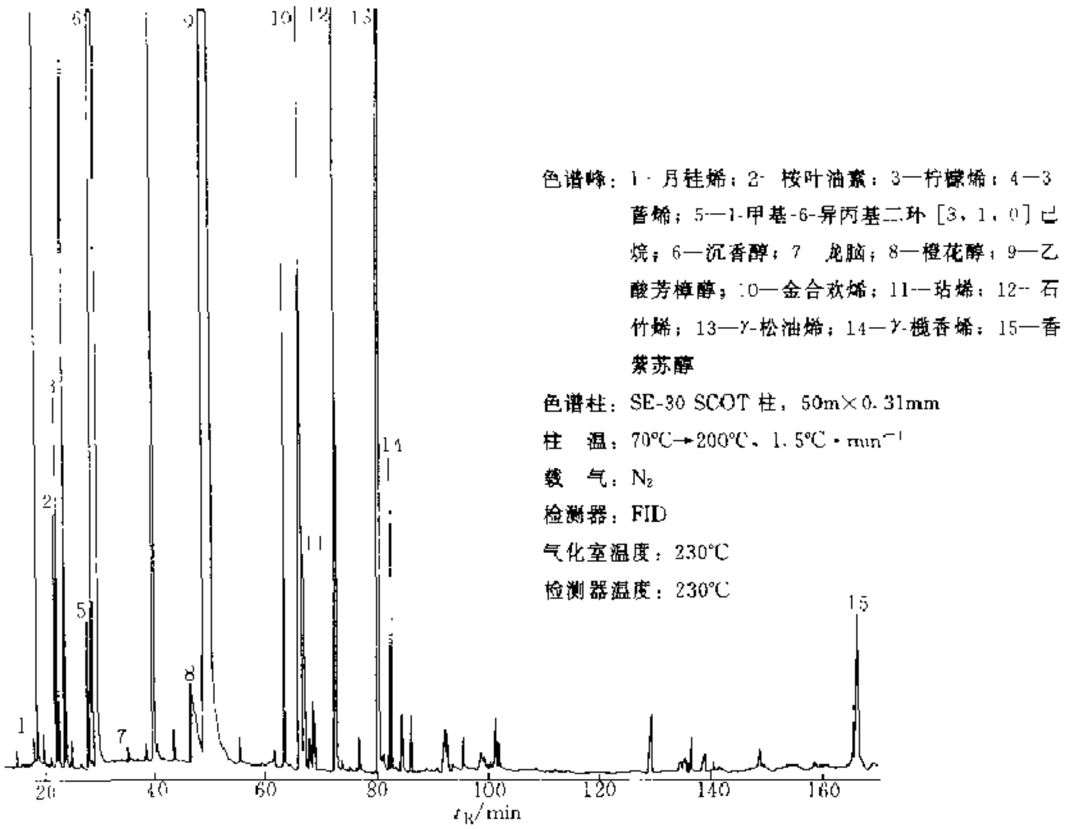
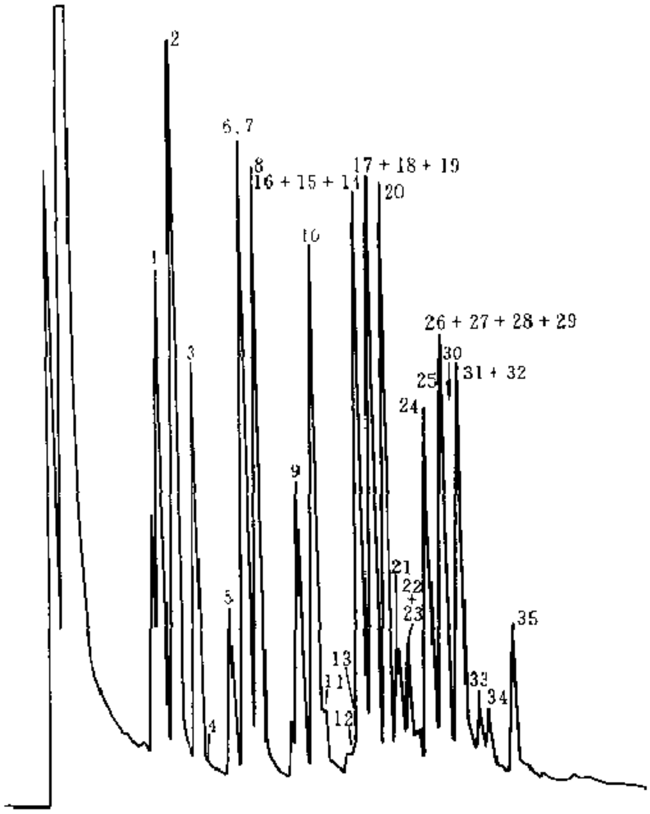


图 29-30　香紫苏油[26]



色谱峰：1—α-蒎烯；2—莰烯；3—β-蒎烯；4—香叶烯；5—苎烯；6—1,8 桉树脑；7—对伞花烃；8—γ-萜基烯；9—芳香醇；10—葑酮；11—α-侧柏酮；12—香茅醛；13—异蒲勒醇；14—薄荷醇；15—薄荷酮；16—异冰片；17—樟脑；18—冰片；19—异薄荷酮；20—α-萜基醇；21—香茅醇；22—橙花醇；23—乙酸里哪酯；24—牻牛儿醇；25—橙花醛；26—蒲勒酮；27—乙酸薄荷酯；28—乙酸冰片酯；29—乙酸异冰片酯；30—香芹酮；31—胡椒酮；32—牻牛儿醛；33—乙酸橙花酯；34—乙酸萜基酯；35—乙酸牻牛儿酯

色谱柱：3%OV-17，Gas Chrom Q（100 目～120 目），3m×2.3mm

柱　温：60℃→165℃，8℃・min^{-1}

载　气：N_2，35ml・min^{-1}

检测器：FID

图 29-31　萜烯[31]

第三节　其他香料色谱图

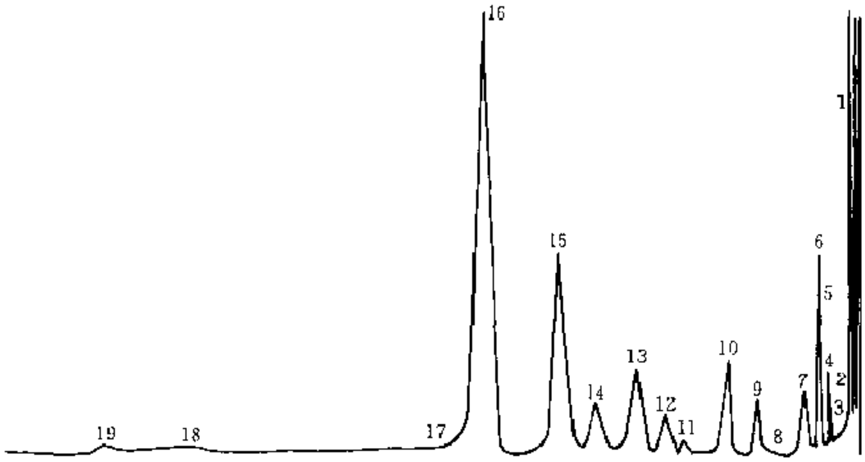


图 29-32　合成萨丽麝香[29]

色谱峰：1—叔丁苯；2—二甲基茚满；3—二叔丁基苯（异构体）；4—对二叔丁基苯；5—异戊基苯乙酮；6—1，1-二甲基6-叔丁基茚满；7—1,1-二甲基叔丁基茚满；8—叔丁基苯乙酮（异构体）；9—四甲基-s-氢化引达省；10—对叔丁基苯乙酮；11—二叔丁基苯乙酮；12—二叔丁基苯乙酮（异构体）；13—二甲基乙酰基茚满；14—二甲基乙酰基茚满（异构体）；15—1,1-二甲基-6-叔丁基-4-乙酰基茚满（内标物）；16—二甲基叔丁基乙酰基茚满（异构体）；17—四甲基乙酰基-s-氢化引达省；18—二甲基异戊基乙酰基茚满；19—未知物

色谱柱：0.5% BE-8347，101 担体（60 目～80 目），3m×3.5mm　　检测器：FID

柱　温：140℃　　气化室温度：280℃

载　气：H_2，40ml・min^{-1}　　检测器温度：220℃

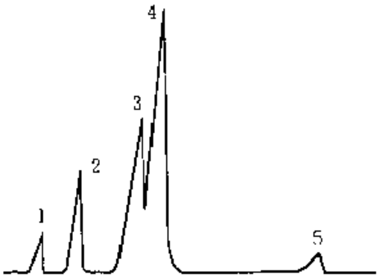


图 29-33 β-十氢萘乙酸酯[30]

色谱峰：1—反，反-β-十氢萘乙酸酯；2—反，顺-β-十氢萘乙酸酯；3—顺，反 β-十氢萘乙酸酯；4—顺，顺-β-十氢萘乙酸酯；5—β-四氢萘乙酸酯

色谱柱：聚乙二醇 20M，50m

柱　温：160℃→230℃，6℃・min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FID

气化室温度：280℃～300℃

检测器温度：235℃

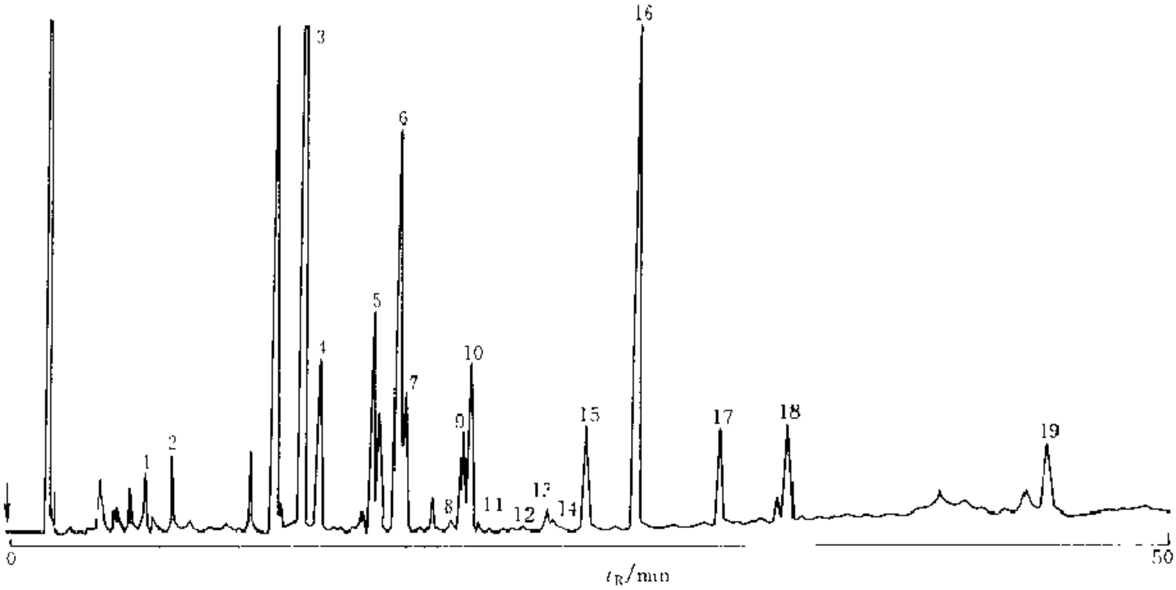
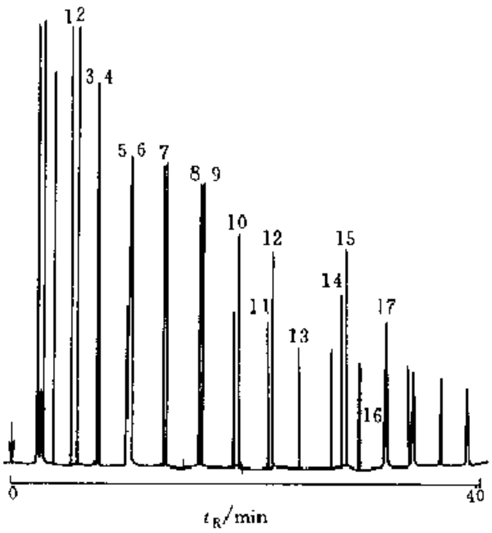


图 29-34　香精（一）

色谱峰：1—糠醛；2—糠醇；3—邻甲氧基苯酚；4—乙基环戊烯-1,2-二酮；5—4-甲基邻甲氧基苯酚；6—苯酚＋邻甲酚；7—正二十烷；8—2,4-二甲酚；9—对甲酚；10—间甲酚；11—2,5-二甲酚；12—2,3-二甲酚；13—3,5-二甲酚；14—丁子香酚；15—正二十二烷＋3,4 二甲酚；16—顺异丁子香酚＋2,6-二甲氧基酚；17—反异丁子香酚；18—正二十四烷；19—香草醛

色谱柱：CP--Wax 51，25m×0.5mm　　载　气：N_2，15kPa

柱　温：170℃→230℃，2℃・min^{-1}　　检测器：FID



色谱峰：1—吡啶；2—2,4,5-三甲基噁唑；3—3-甲基吡啶；4—1-戊醇；5—庚酸乙酯；6—1-己醇；7—1-庚醇；8—里哪酯；9—1-辛醇；10—1-壬醇；11—香茅醇；12—1-癸醇；13—3-乙酰吡啶；14—茴香醛；15—肉桂醛；16—δ-癸内酯；17—茴香醇

色谱柱：CP—Wax 52CB，50m×0.32mm，d_f=0.2μm

柱　温：60℃→260℃，3℃・min^{-1}

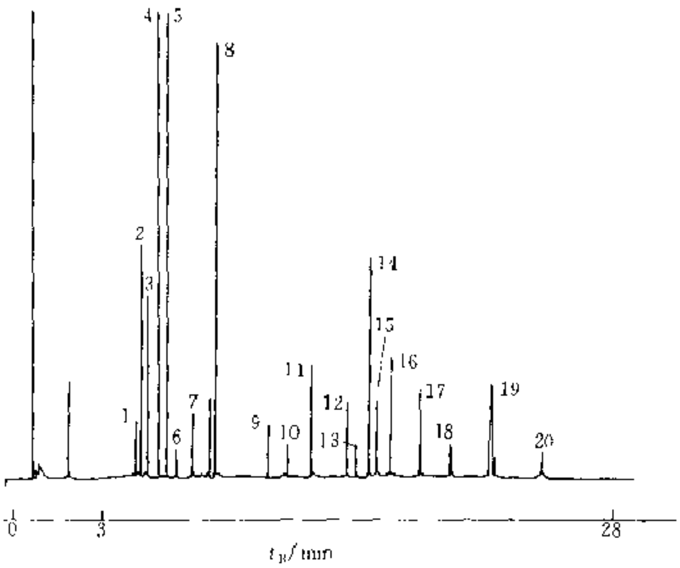
载　气：N_2，39cm・s^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：275℃

图 29-35　香精（二）[27]



色谱峰：1—苯甲醛；2—乙基α羟基异戊酸；3—β辛醛；4—己酸乙酯；5—乙酸己酯；6—苯甲醇；7—1苯乙醇；8—里哪醇；9—水杨酸甲酯；10—橙花醇；11—肉桂醛；12—氨茴酸甲酯；13—丁子香酚；14—肉桂酸甲酯；15—香草醛；16—α-紫罗酮；17—β-紫罗酮；18—甲基-N-甲酰氨茴酸酯；19—姜油酮；20—苯甲酸苯酯

色谱柱：SE-52，25m×0.32mm

柱　温：50℃(3min)→200℃，6℃·min

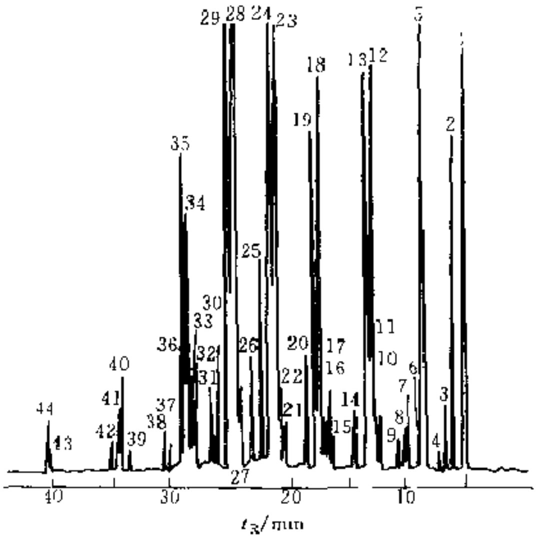
载　气：He，65kPa

检测器：FID

气化室温度：220℃

检测器温度：250℃

图 29-36　香精（二）



色谱峰：1—己酸；2—甲基己酸；4—八碳-4-烯酸；5—辛酸；6—八碳-5-烯酸；7—7-甲基己酸；9—壬酸；12—十碳-5-烯酸；13—癸酸；14—9-甲基癸酸；16—十二碳-5-烯酸；18—十二碳-9-烯酸；19—十二酸；20—11-甲基十二酸；22—十四碳-5-烯酸；23—十四碳-9-烯酸；24—十四酸；25—13-甲基十四酸；26—十五酸；27—十六碳-6,9-二烯酸；28—十六碳-9-烯酸；29—十六酸；30—8-甲基十六酸；31—15-甲基十六酸；32—十八碳-6,9-二烯酸；33—十八碳-9,12-二烯酸；34—十八碳-9-烯酸；35—十八碳-11-烯酸；36—十八酸；39—二十碳-8,11-二烯酸；40—二十碳-11-烯酸；41—二十碳-13-烯酸；42—二十酸；43—二十二碳-13-烯酸；44—二十二碳-15-烯酸；3、8、10、11、17、37—非酸类组分；15、21、38—未知物

色谱柱：SE-54，28m×0.21mm　　检测器：MS

柱　温：100℃→240℃，6℃·min^{-1}　　气化室温度：250℃

载　气：He，1ml·min^{-1}

图 29-37　河狸肛腺脂肪酸(DMOX 衍生物)[32]

参 考 文 献

1　祝美莉，黄枢萱，赵佳平等. 全国第二届毛细管色谱报告会文集，1984：397

2　李兆琳，赵凡智，陈能煜等. 色谱，1988；6：18

3　马莲，郑璐青，孙亦梁等. 色谱，1988；6：11

4　戴亮，杨兰萍，郭友嘉等. 色谱，1992；10：280

5　郭友嘉，戴亮，任清等. 第九次全国色谱学术报告会文集，1993：235

6　薛献席，李玫. 第九次全国色谱学术报告会文集，1993：239

7　Shimadzu. Application News，C180-0027

8　Bartley J P. Chromatographia，1987；23：129

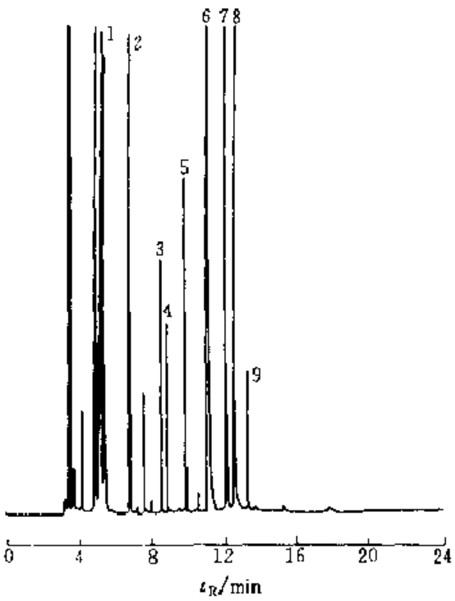
9　Gavelli A，Lozano J. HRC，1989；12：188

10 Rizzolo A, Polesello A, Poleselb S. HRC, 1992; 15: 472
11 林正奎，华映芳. 植物学报，1988; 30: 623
12 朱建设. 第九次全国色谱学术报告会文集，1993; 265
13 钟山，冯子刚. 分析化学，1995; 23: 132
14 黄遥延，吴惠勤，黄励岗等. 全国第二届毛细管色谱报告会文集，1984: 389
15 郭友嘉，戴亮，杨兰萍等. 色谱，1993; 11: 191
16 豆惠君，田乃琦，冯宝树等. 色谱，1985; 2: 75
17 詹益兴. 色谱，1985; 2: 190
18 GB 11424—89. 中国国家标准汇编，1992; 129: 274
19 Supelo Inc. J Chorm Sci, 1987; 25: 88
20 郭振德，刘莉玫，陈雪亮等. 色谱，1987; 5: 31
21 吴筑平，刘密新，华玉新. 色谱，1987; 5: 326
22 黄远征，何宗英，陈树群等. 第九次全国色谱学术报告会文集，1993; 259
23 潘自连，梁健，赵惠. 第十次全国色谱学术报告会文集，1995; 116
24 Ekundayo O. J Chrom Sci, 1980; 18: 368
25 Kimball B A, Craver R K, Johrston J J, et al. HRC, 1995; 18: 211
26 黎光，郑瑶青，孙亦梁等. 分析测试通报，1991; 10(2): 12
27 Chrompack News. 1986; 13(3): 4
28 姜庚信，朱建设. 第九次全国色谱学术报告会文集，1993: 253
29 韩桂荣，孙玉英，徐文英等. 第二次全国石油化工色谱学术报告会文集，1986: 101
30 程大川，周银凤. 分析化学，1984; 12: 316
31 Lemberkovics E. J Chromatogr, 1984; 286: 293
32 虞启海，杨一鸣，徐宏发等. 色谱，1992; 10: 151

（李浩春　李全洪）

第三十章　食品色谱图

第一节　食物色谱图



色谱峰：1—α-蒎烯；2—莰烯；3—β-蒎烯；4—桧烯；5—香叶烯；6—柠檬烯；7—β-伞花烃；8—γ-松油烯；9—p-伞花烃

色谱柱：PEG-20M，50m×0.25mm，d_f=0.3μm

柱　温：50℃→210℃，4℃·min⁻¹

载　气：He，44cm·s⁻¹

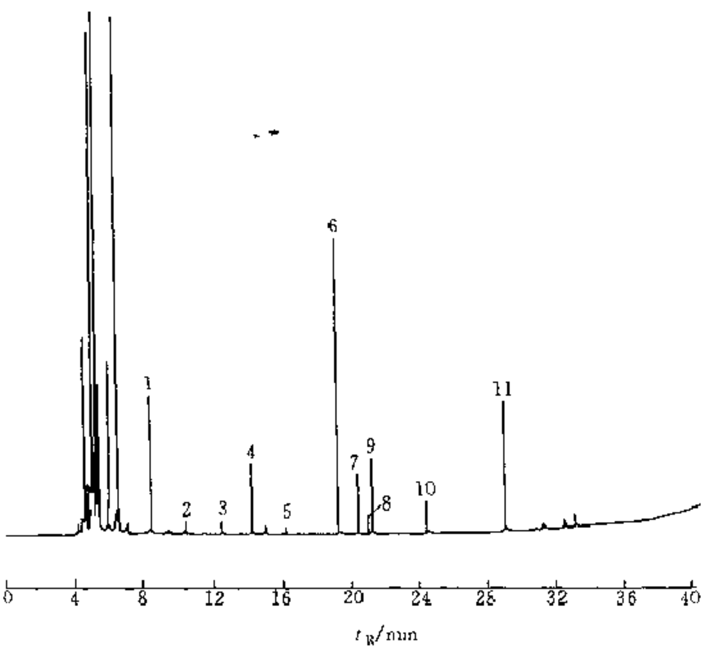
检测器：FID

气化室温度：120℃

检测器温度：250℃

进样方式：顶空法

图 30-1　芹菜[1]



色谱峰：1—己醛；2—2-甲基-2-戊醛；3—甲基丙基二硫化物；4—2,4-二甲基噻吩；5—反-1-丙烯基甲基二硫化物；6—二丙基二硫化物；7—顺-1-丙烯基丙基二硫化物；8—烯丙基丙基二硫化物；9—反-1-丙烯基丙基二硫化物；10—丙酸；11—二丙基三硫化物

色谱柱：PEG-20M，50m×0.25mm，d_f=0.3μm

柱　温：50℃→210℃，4℃·min⁻¹

载　气：He，44cm·s⁻¹

检测器：FID

气化室温度：120℃

检测器温度：250℃

进样方式：顶空法

图 30-2　洋葱[2]

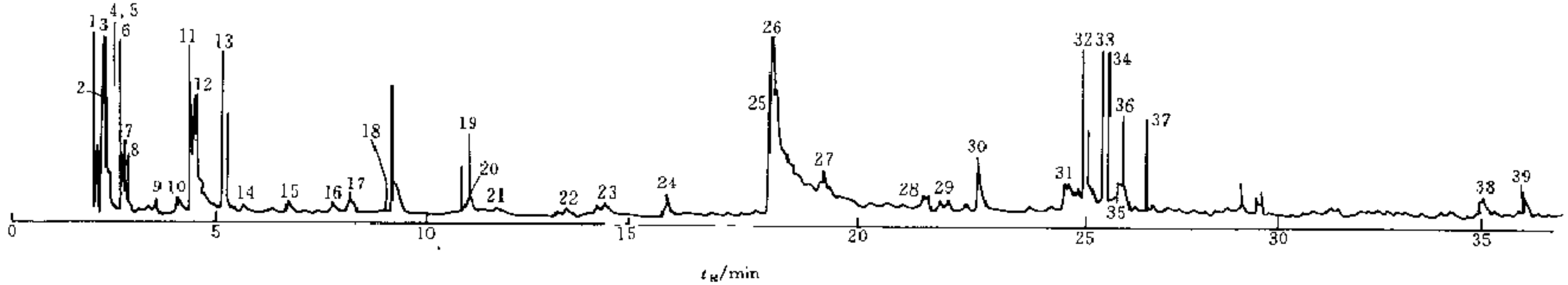


图 30-3　香菜[4]

色谱峰：1—甲丙醚；2—二甲基膦；3—异戊醇；4—3-甲基呋喃；5—2-甲基-3-丙基顺环氧乙烷；6—3,3-二甲基-2-丁醇；7—4,4-二甲基-2-戊醇；8—1-甲硫基丙烯；9—2-甲基反环戊醇；10—1,5-二甲基-1H-吡唑；11—3-乙烯醇；12—3,3′-硫代二丙烯；13—2,2,3,4-四甲基戊烷；14—1,2-二噁烷；15—2-蒈烯；16—顺-十氢化萘；17—顺-蒎烷；18—苎烯；19—3,4-二氢异噻唑；20—2-壬醇；21—十一烷；22—顺罗勒烯；23—N,N'-二甲基乙基二硫代酰胺；24—正壬醛；25—正癸醛；26—1-己基-3-甲基环戊烷；27—四氢甲哪醇；28—1,2,3,4-连四硫庚环；29—香茅酸甲酯；30—1,9-壬二醇；31—1,10-癸二醇；32—AR-姜黄烯；33—α-姜烯；34—D-大牻牛儿烯；35—α-法尼烯；36—β-甜没药烯；37—顺-β-法尼烯；38—正丙酸香茅酯；39—正丙酸牻牛儿酯

色谱柱：DB-5，30m×0.24mm，d_f=0.25μm

柱　温：80℃(5min)→200℃(15min)，4℃·min^{-1}

载　气：He，2×10^5 Pa

检测器：离子阱

进样方式：顶空进样

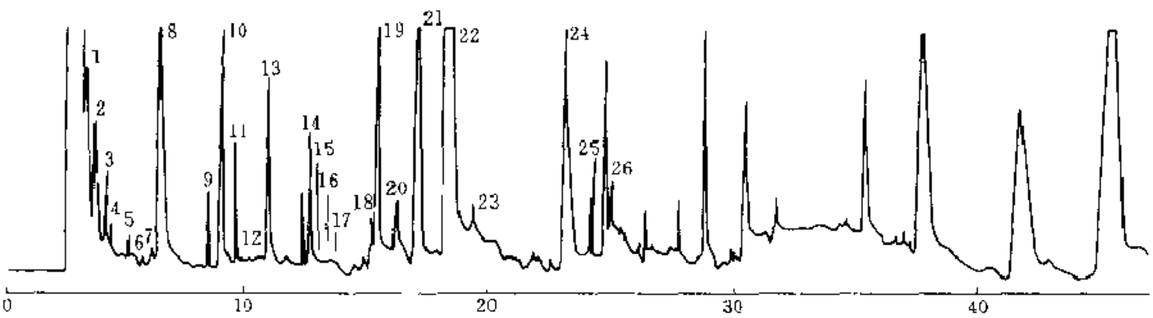


图 30-4 榨菜挥发物[4]

色谱峰：1—乙酸乙酯；2—3-丁烯腈；3—1-戊烯-3-醇；4—1,1-二乙氧基乙烷；5—1-己烯-3-醇；6—糠醛；7—2-甲基-2-戊烯醛；8—烯丙基异硫氰酸酯；9—苯甲醛；10—二甲基三硫；11—1,3-二乙基苯；12—苯甲醇；13—柠檬烯；14—芳樟醇；15—苯乙醛；16—苯乙醇；17—苯乙腈；18—辛酸乙酯；19—1-烯丙基-4-甲氧基苯；20—3-苯基丙腈；21—1-甲氧基-4-(1-丙烯)-苯；22—7-甲氧基苯并呋喃；23—β-甜没药烯；24—2-苯乙基异硫氰酸酯；25—花侧柏烯；26—2,5-二甲基十三烷

色谱柱：OV-101，33m×0.26mm

柱　温：80℃→250℃，5℃·min⁻¹

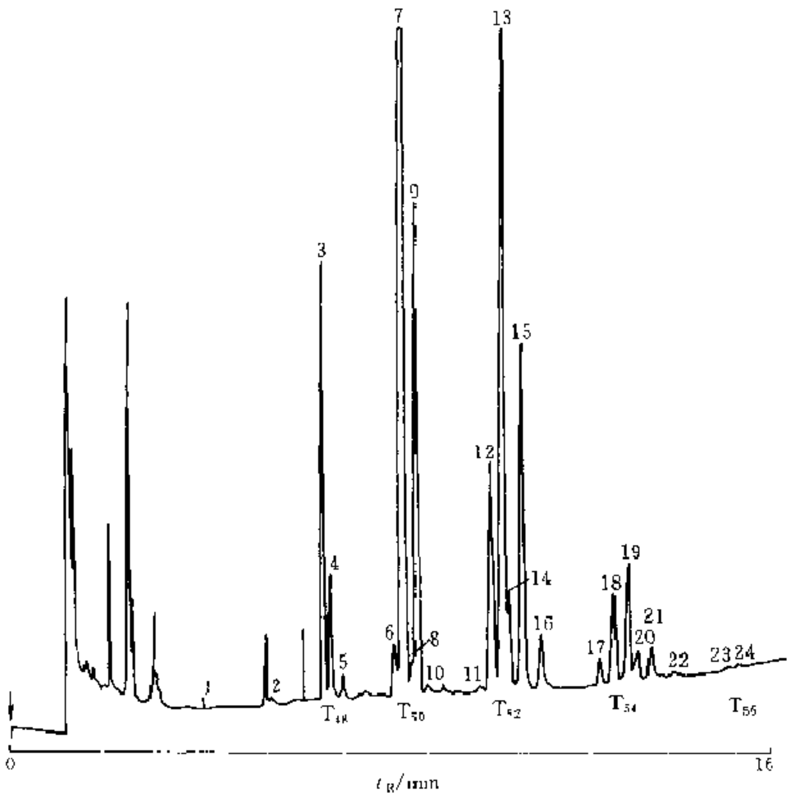


图 30-5 棕榈树油(酯化衍生物)[4]

色谱峰❶：1—MPP；2—MOM；3—PPP；4—MOP；5—MLP；6—PPS；7—POP；8—MOO；9—PLP；10—MLO；11—PSS；12—POS；13—POO；14—PLS；15—PLO；16—PLL；17—SOS；18—SOO；19—OOO；20—SLO；21—OLO；22—OLL；23—SOA；24—AOO

色谱柱：50% 苯基甲基硅氧烷，25m×0.25mm，d_f=0.10μm　　载　气：H_2，10kPa

柱　温：340℃(1min)→355℃，1℃·min⁻¹　　检测器：FID

❶ 酸的代号：M——十四酸；P——十六酸；S——十八酸；O——油酸；L——亚油酸；A——二十酸

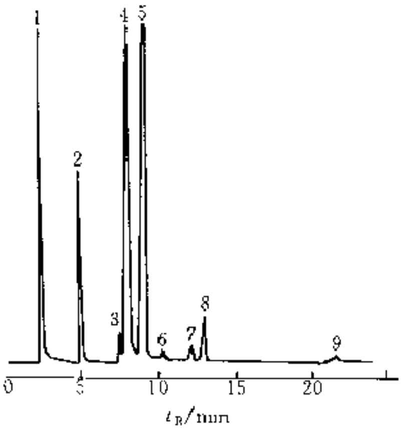


图 30-6　酸枣仁油中脂肪酸(甲酯衍生物)[5]

色谱峰：1—溶剂；2—棕榈酸；3—硬脂酸；4—油酸；5—亚油酸；6—亚麻酸；7—花生酸；8—花生烯酸；9—山芋酸

色谱柱：PEG-20M，26m×0.22mm

柱　温：180℃

载　气：N_2

检测器：FID

气化室温度：200℃

检测器温度：200℃

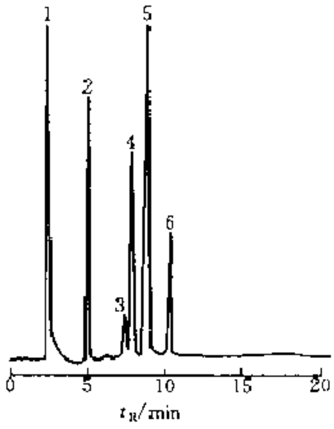


图 30-7　豆油中脂肪酸(甲酯衍生物)[5]

色谱峰：1—溶剂；2—棕榈酸；3—硬脂酸；4—油酸；5—亚油酸；6—亚麻酸

色谱柱：PEG-20M，26m×0.22mm

柱　温：180℃

载　气：N_2

检测器：FID

气化室温度：200℃

检测器温度：200℃

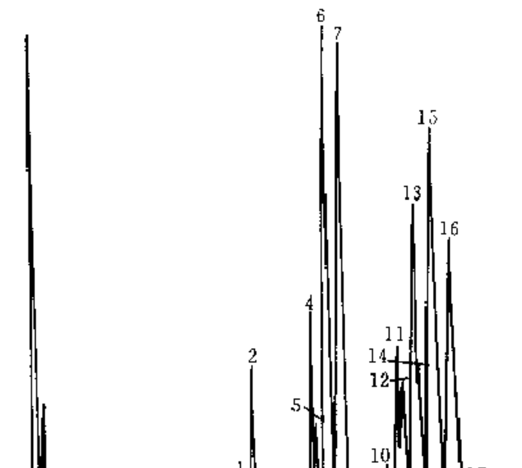


图 30-8　豆油(甘油三酸酯)[6]

色谱峰❶：1—POP；2—PLP；3—POS；4—POO；5—PLS；6—PLO；7—PLL；8—PLLn；9—SOS；10—SOO；11—OOO；12—SLO；13—OOL；14—SLL；15—OLL；16—LLL；17—LLLn

色谱柱：TAP CB，25m×0.25mm，d_f=0.01μm

柱　温：340℃(1min)→365℃(10min)，1℃·min^{-1}

载　气：H_2，80kPa　　气化室温度：350℃

检测器：FID　　检测器温度：425℃

❶均为甘油三酸酯，酸的代号：P——十六碳烷酸；S——十八碳烷酸；O——油酸；L——亚油酸；Ln——亚麻酸

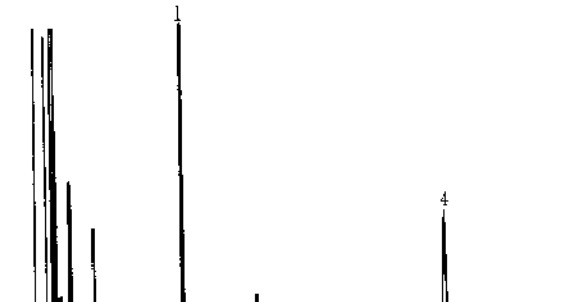


图 30-9　豆油[7]

色谱峰：1—5-α-胆甾烷(内标物)；2—菜籽甾醇；3—豆甾醇；4—β-谷甾醇

色谱柱：SAC-5，30m×0.25mm，d_f=0.25μm

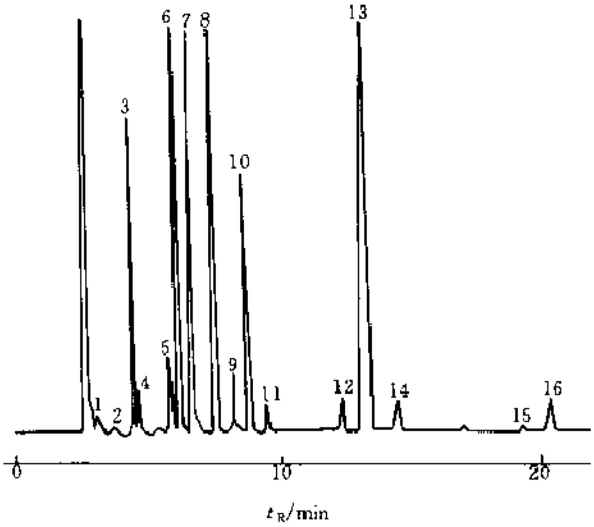
柱　温：265℃

载　气：He，20cm·s^{-1}(265℃)

检测器：FID

气化室温度：300℃

检测器温度：300℃



色谱峰：1—正十二酸；2—正十四酸；3—正十六酸；4—十六碳一烯酸；5—正十八酸；6—十八碳一烯酸；7—十八碳二烯酸；8—十八碳三烯酸；9—正二十酸；10—二十碳一烯酸；11—二十碳二烯酸；12—正二十二酸；13—二十二碳一烯酸；14—二十二碳二烯酸；15—正二十四酸；16—二十四碳一烯酸

色谱柱：FFAP，26m×0.29mm

柱　温：230℃

载　气：N_2，18cm・s^{-1}

图 30-10　菜籽油中脂肪酸(甲酯衍生物)[8]

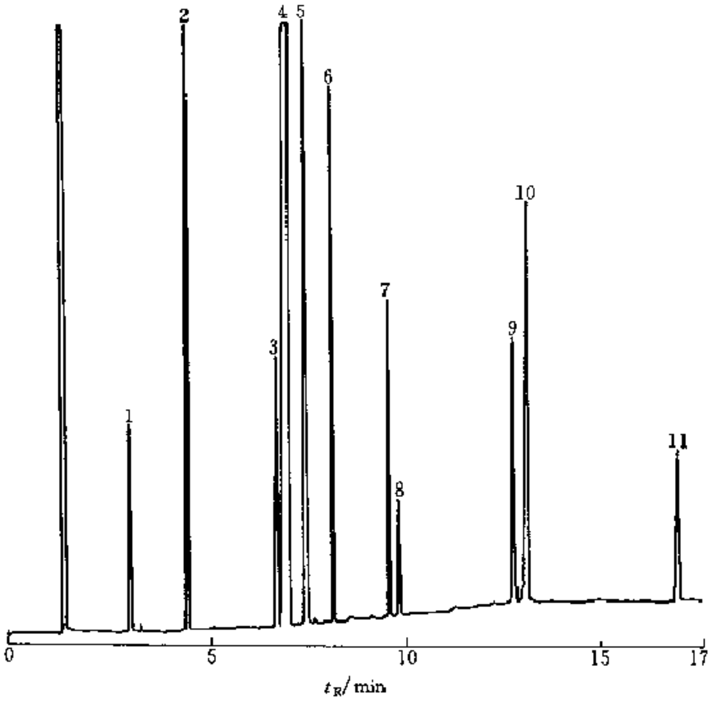


图 30-11　菜籽油中脂肪酸(甲酯衍生物)—AOCS 标准[9]

色谱峰：1—十四碳烷酸；2—十六碳烷酸；3—十八碳烷酸；4—油酸；5—亚油酸；6—亚麻酸；7—二十碳烷酸；8—二十碳烯一酸；9—二十二碳烷酸；10—芥酸；11—二十四碳烷酸

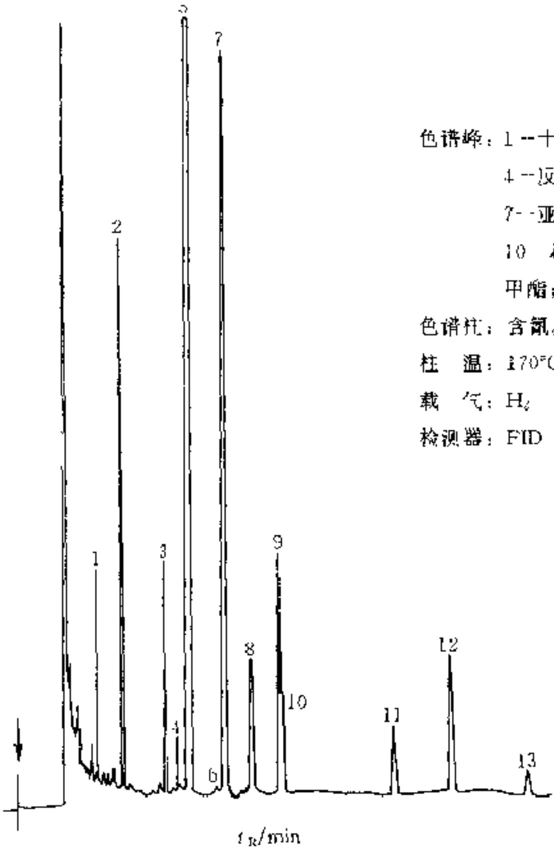
色谱柱：DB—Wax，30m×0.53mm，d_f=1.0μm

柱　温：220℃(7min)→250℃，5℃・min^{-1}

载　气：He，6ml・min^{-1}

检测器：FID

进样方式：直接进样



色谱峰：1—十四酸甲酯；2—十六酸甲酯；3—十八酸甲酯；4—反油酸甲酯，5—油酸甲酸；6—反亚油酸甲酯；7—亚油酸甲酯；8—二十酸甲酯；9—亚麻酸甲酯；10—花生烯酸甲酯；11—二十二酸甲酯；12—芥酸甲酯；13—二十四酸甲酯

色谱柱：含氰基的硅氧烷，25m×0.25mm

柱 温：170℃

载 气：H_2

检测器：FID

图 30-12 菜籽油中脂肪酸甲酯[12]

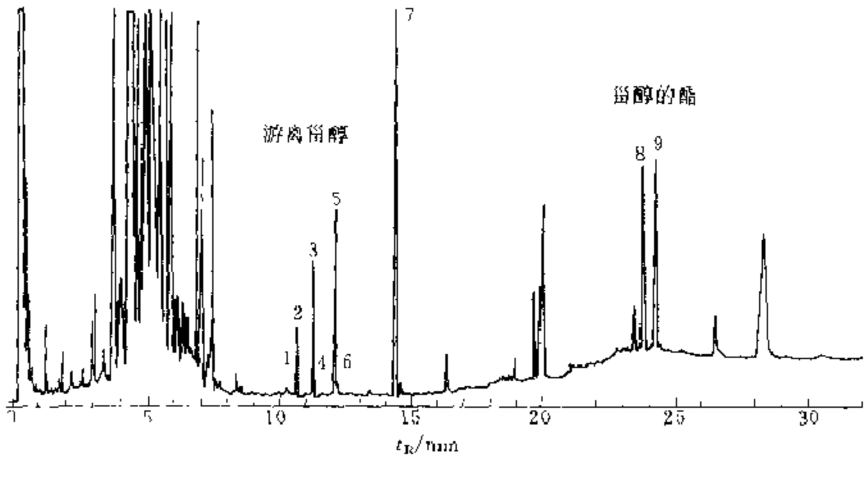


图 30-13 硅烷化菜籽油(甲酯衍生物)[13]

色谱峰：1—胆甾醇；2—菜籽甾醇；3—芸苔甾醇；4—豆甾醇；5—β-谷甾醇；6—Δ^5-燕麦甾醇；7—桦木酮（内标）；8—芸苔-十八碳酯；9—β-谷-十八碳酯

色谱柱：DB-5，10m×0.32mm，d_f=0.1μm

柱 温：100℃(1min)→350℃(10min)，10℃·min⁻¹

载 气：H_2，2.0ml·min⁻¹

检测器：FID

检测器温度：360℃

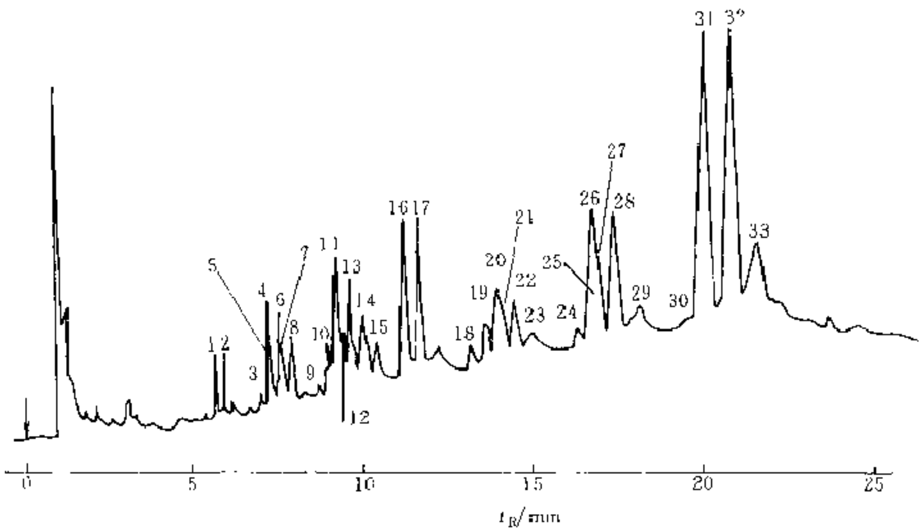


图 30-14 菜籽油(C_{50}~C_{64}甘油三酸酯)[12]

色谱峰❶：1—POP；2—PLP；3—POS；4—POO；5—PLS；6—PLO；7—PLnS；8—PLL；9—POA+SOS；10—POGa+SOO；11—PLA+SLS+OOO；12—PLGa+SLO；13—OLO；14—OLL；15—LLL；16—POEr+SOGa+AOO；17—PLEr+SLGa+ALO；18—POLg+[illegible]+SErS；19—PGaEr+SOEr+BeOO；20—ErOO；21—SLEr+BeLO；22—ErLO；23—ErLL；24—PErEr；25—SGaEr；26—OGaEr；27—ALEr+BeLGa+LgLO；28—GaLEr；29—GaLnEr；30—SErEr；31—OErEr；32—ErLEr；33—ErLnEr

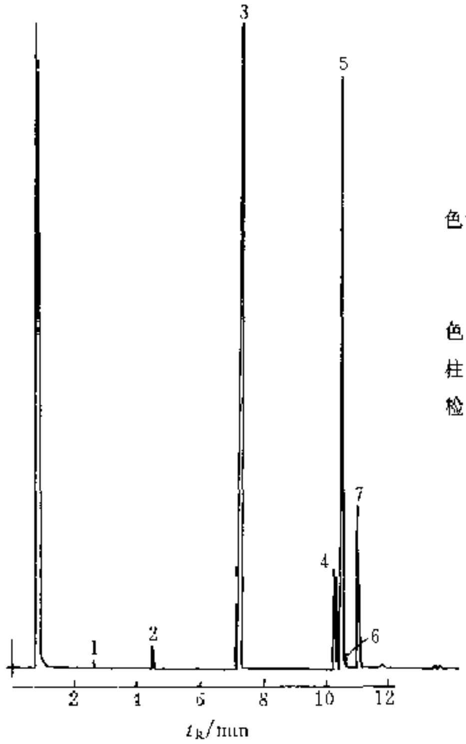
❶ 酸的代号：P—十六烷酸；S—十八烷酸；A—二十烷酸；Be—二十二烷酸；Lg—二十四烷酸；O—油酸；L—亚油酸；Ln—亚麻酸；Ga—二十碳烯酸；Er—芥酸

色谱柱：50%苯基甲基硅氧烷，25m×0.25mm，d_f=0.10μm

柱 温：340℃(1min)→350℃，1℃·min⁻¹

载 气：H_2，10kPa

检测器：FID



色谱峰：1—十二碳酸；2—十四碳酸；3—十六碳酸；4—9,12-十八碳二烯酸；5—顺-6-十八碳烯酸；6—反-6-十八碳烯酸；7—十八碳酸

色谱柱：BP1，50m×0.22mm，d_f=0.25μm

柱 温：140℃→200℃，4℃·min^{-1}

检测器：FID

图 30-15 棉籽油(甲酯衍生物)

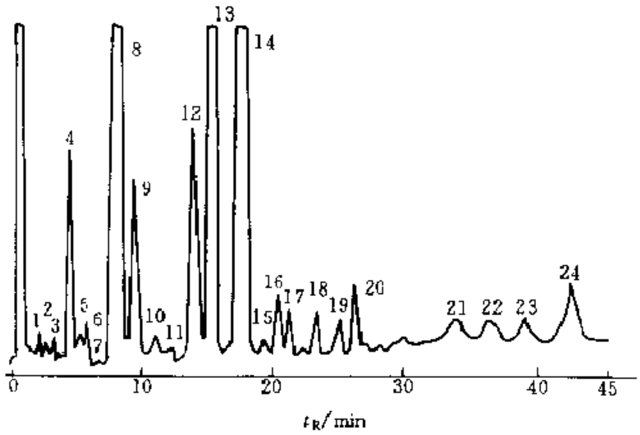


图 30-16　尼罗罗非鱼油(甲酯衍生物)[14]

色谱峰：1—十一碳烷酸；2—十二碳烷酸；3—十三碳烷酸；4—十四碳烷酸；5—十五碳烷酸；6—12-甲基-十四碳烷酸；7—十六碳烷酸；8—14-甲基-十五碳烷酸；9—9-十六碳烯酸；10—十七碳烷酸；11—15-甲基-11-十六碳烯酸；12—十八碳烷酸；13—9-十八碳烯酸；14—9,12-十八碳二烯酸；15—9,12,15-十八碳三烯酸；16—二十碳烷酸；17—11-二十碳烯酸；18—10,13-二十碳二烯酸；19—7,10,13-二十碳三烯酸；20—5,8,11,14-二十碳四烯酸；21—6,9,12,15-二十二碳四烯酸；22～24—未知峰

色谱柱：8% DEGS，101白色硅烷化担体(80目～100目)，2m×3mm

柱　温：175℃(10min)→215℃，3℃·min^{-1}

载　气：N_2，40ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：270℃

检测器温度：270℃

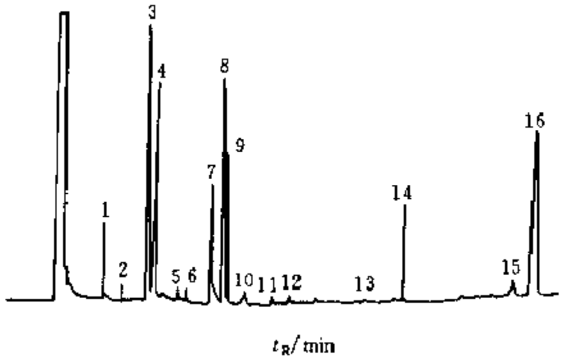


图 30-17　马面鲀鱼油(甲酯衍生物)[15]

色谱峰：1—十四碳烷酸；2—十五碳烷酸；3—十六碳烷酸；4—十六碳一烯酸；5—十七碳烷酸；6—十七碳一烯酸；7—十八碳烷酸；8，9—十八碳一烯酸；10—十八碳二烯酸；11—十八碳三烯酸；12—十八碳四烯酸；13—二十碳四烯酸；14—二十碳五烯酸；15—二十二碳五烯酸；16—二十二碳六烯酸

色谱柱：PEG-20M，30m×0.25mm

柱　温：185℃(8min)→240℃，5℃·min^{-1}

载　气：Ne

检测器：MS

气化室温度：280℃

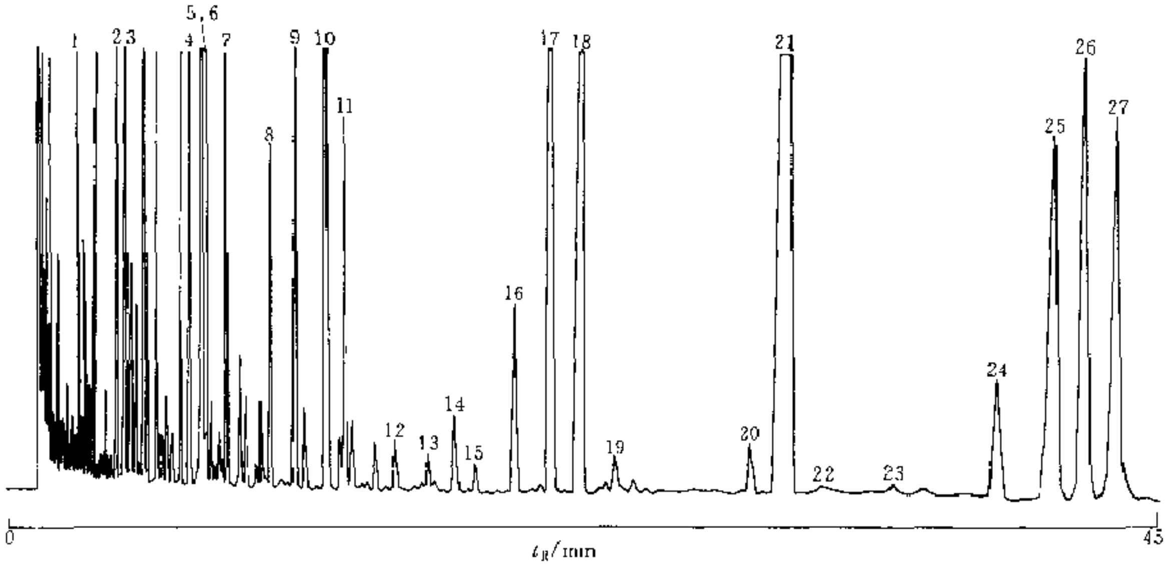


图 30-18 步鱼油(脂肪酸甲酯)[13]

色谱峰：1—十四酸；2—十六酸；3—十六碳一烯酸；4—十八酸；5，6—十八碳一烯酸；7—十八碳二烯酸；8—十八碳三烯酸；9—十八碳四烯酸；10—二十酸；11—二十碳一烯酸；12—二十碳二烯酸；13，15—二十碳三烯酸；14，16—二十碳四烯酸；17—二十碳五烯酸；18—二十二酸；19—二十二碳一烯酸；20—二十一碳五烯酸；21—二十三酸(内标物)；22—二十二碳四烯酸；23，24—二十二碳五烯酸；25—二十四酸；26—二十二碳六烯酸；27—二十四碳一烯酸

色谱柱：DB-WAX，30m×0.25mm，d_f=0.25μm　　检测器：FID

柱　温：200℃　　气化室温度：250℃

载　气：He，35cm・s^{-1}(200℃)　　检测器温度：300℃

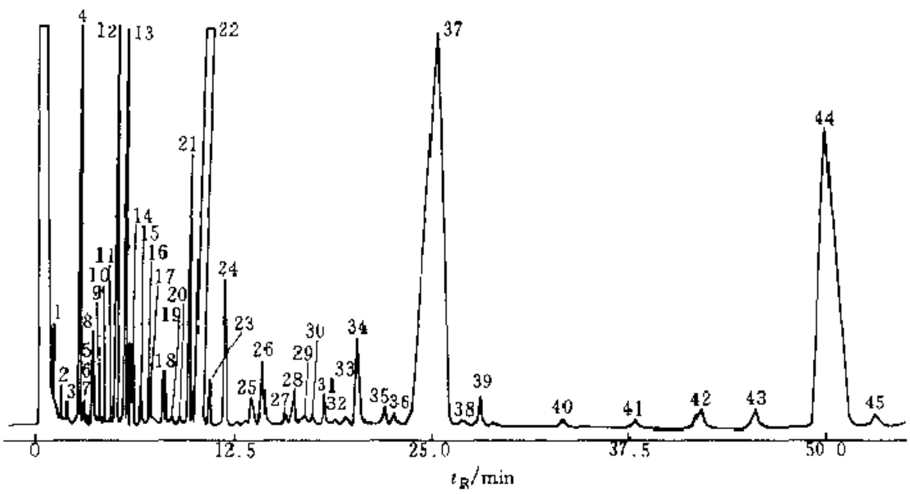


图 30-19 虾蛄肉中脂肪酸(甲酯衍生物)[16]

色谱峰：1—正辛酸；2—正癸酸；3—正十一酸；4—正十二酸；5—十二碳一烯酸；6—正十三酸；7—十三碳一烯酸；8—正十四酸；9—十四碳一烯酸；10—正十五酸；11—十五碳一烯酸；12—正十六酸；13—十六碳一烯酸；14，15—十六碳二烯酸；16—支链十七烷酸；17—十六碳三烯酸；18—十七碳一烯酸；19—正十七酸；20—十七碳一烯酸；21—正十八酸；22—十八碳一烯酸；23，24—十八碳二烯酸；25，26，27—十八碳三烯酸；28，29—十八碳四烯酸；30—正二十酸；31—二十碳一烯酸；32—二十碳二烯酸；33，35—二十碳三烯酸；34，36—二十碳四烯酸；37—二十碳五烯酸；38—正二十二酸；39—二十二碳一烯酸；40—二十一碳五烯酸；41—二十二碳三烯酸；42—二十二碳四烯酸；43—二十二碳五烯酸；44—二十二碳六烯酸；45—正二十四酸

色谱柱：PEG-20M，50m×0.35mm　　检测器：FID

柱　温：170℃→192℃，5℃・min^{-1}　　气化室温度：250℃

载　气：N_2，1.5 ml・min^{-1}　　检测器温度：250℃

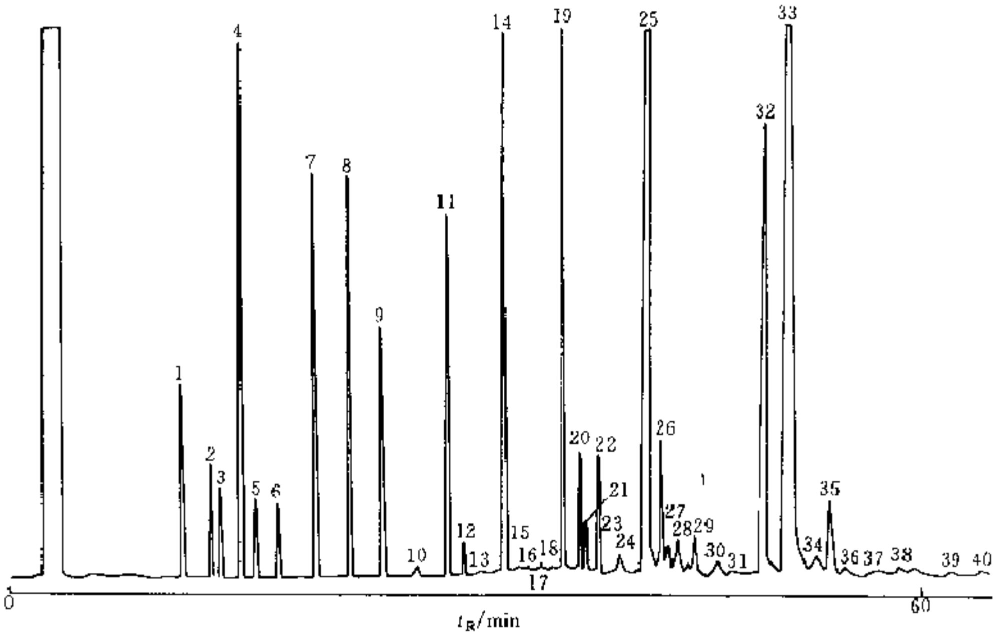


图 30-20　奶脂中游离酸[5]

色谱峰❶：1—乙酸；2—丙酸；3—异丁酸；4—丁酸；5—异丁酸；6—戊酸；7—己酸；8—庚酸；9—辛酸；10—壬酸；11—癸酸；12—十碳烯酸；13—十一酸；14—十二酸；15—十二碳烯酸；16—十三碳异构酸；17—十三酸；18—十四碳异构酸；19—十四酸；20—十四碳烯酸＋十五碳异构酸；21—十五碳反异构酸；22—十五酸；23—十五碳烯酸；24—十六碳异构酸；25—十六酸；26—十六碳烯酸；27—十七碳异构酸；28—十七碳反异构酸；29—十七酸；30—十七碳烯酸；31—十八碳异构酸；32—十八酸；33—十八碳烯酸；34，35—十八碳二烯酸；36—十九酸；37—十八碳三烯酸；38—十八碳共轭二烯酸；39—二十酸；40—二十碳烯酸

色谱柱：FFAP-CB，25m×0.32mm，d_f＝0.3μm

柱　温：40℃(0.2min)→100℃(0.2min)，25℃·min⁻¹，→240℃(17min)，10℃·min⁻¹

载　气：He，60kPa　　检测器：FID　　检测器温度：280℃

❶乙酸～辛酸(即峰1～9)系添加的酸，原样中无这9个酸

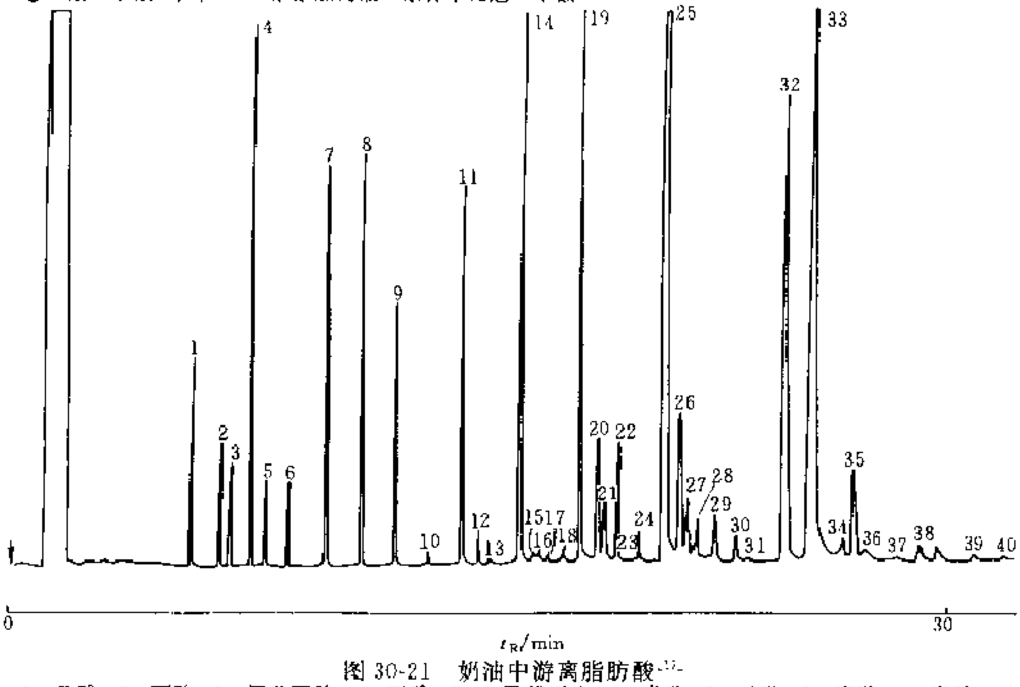


图 30-21　奶油中游离脂肪酸[17]

色谱峰：1—乙酸；2—丙酸；3—甲基丙酸；4—丁酸；5—3-甲基丁酸；6—戊酸；7—己酸；8—庚酸；9—辛酸；10—壬酸；11—癸酸；12—十碳烯酸；13—十一酸；14—十二酸；15—十二碳烯酸；16—十三碳异构酸；17—十三碳酸；18—十四碳异构酸；19—十四酸；20—十四碳烯酸＋十五碳异构酸；21—十五碳反异构酸；22—十五酸；23—十五碳烯酸；24—十四碳异构酸；25—十六酸；26—十六碳烯酸；27—十七碳异构酸；28—十七碳反异构酸；29—十七酸；30—十七碳烯酸；31—十八碳异构酸；32—十八酸；33—十八碳烯酸；34,35—十八碳二烯酸；36—十九酸；37—十八碳三烯酸；38—十八碳共轭烯酸；39—二十酸；40—二十碳烯酸

色谱柱：FFAP，25m×0.32mm　　载　气：He，2ml·min⁻¹　　进样方式：冷柱上进样

柱　温：65℃→240℃，10℃·min⁻¹　　检测器：FID

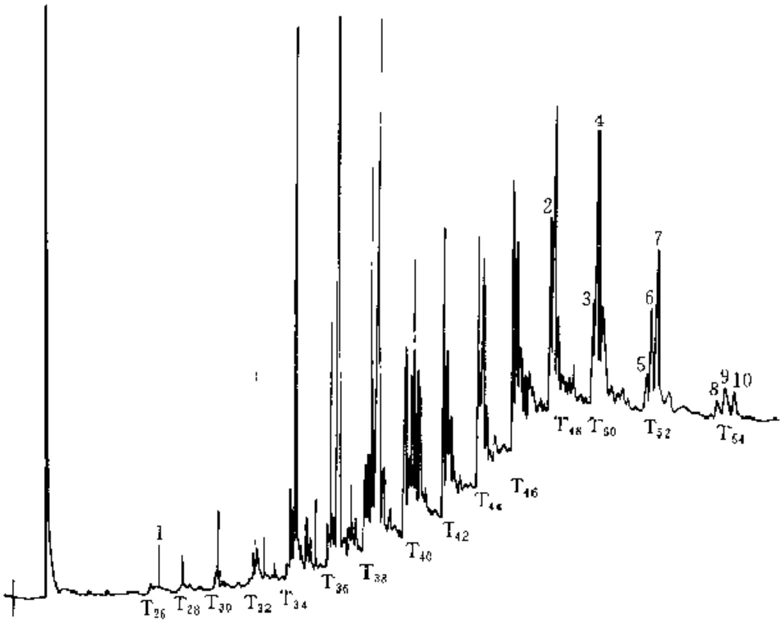


图 30-22　奶油(甘油三酸酯)[18]

色谱峰❶：1—胆固醇；2—PPP；3—PPS；4—PPO；5—PSS；6—PSO；7—POO；8—SSO；9—SOO；10—OOO

❶酸的代号：P——十六烷酸；S——十八烷酸；O——油酸

色谱柱：50HT，25m×0.25mm，d_f=0.1μm

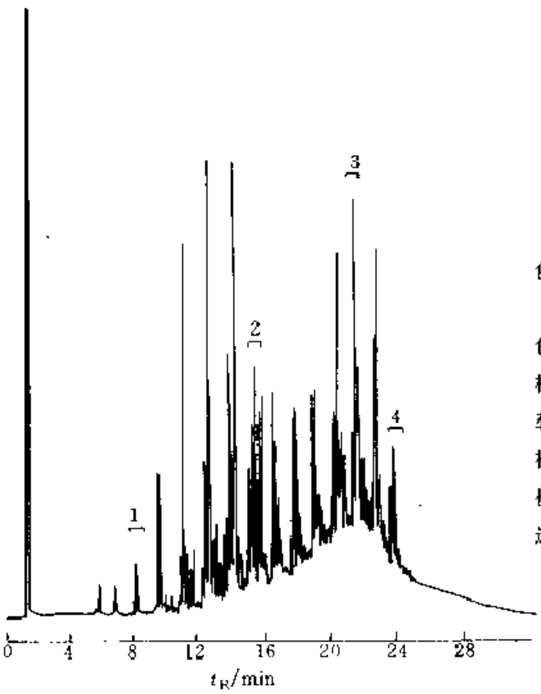
柱　温：250℃→365℃，5℃·min⁻¹

载　气：H_2，1ml·min⁻¹

检测器：FID

气化室温度：60℃→400℃

检测器温度：420℃



色谱峰：1—C_{30}甘油三酸酯；2—C_{40}甘油三酸酯；3—C_{50}甘油三酸酯；4—C_{54}甘油三酸酯

色谱柱：CBM65，25m×0.25mm，d_f=0.1μm

柱　温：240℃(1min)→390℃，6℃·min⁻¹

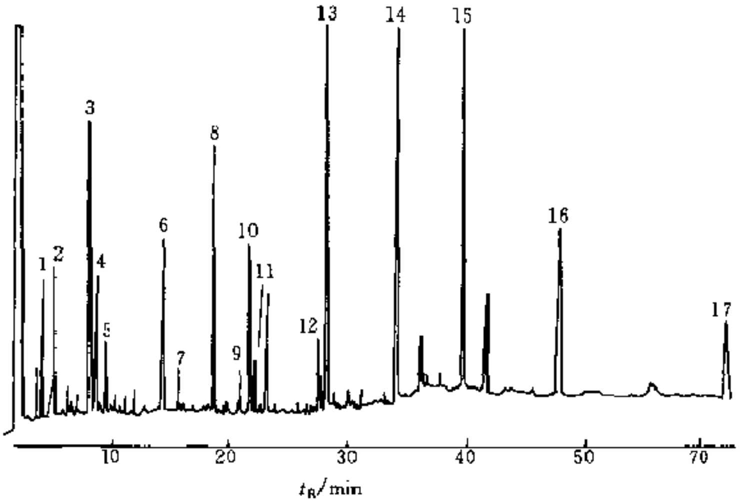
载　气：He

检测器：FID

检测器温度：400℃

进样方式：柱头进样(60℃→400℃，250℃·min⁻¹)

图 30-23　奶油[19]



色谱峰：1—2-戊酮；2—丁酸乙酯；3—2-庚酮；4—庚醇；5—己酸乙酯；6—2-壬酮；7—辛酸乙酯；8—樟脑(内标物)；9—2-十一酮；10—丁酸；11—癸酸乙酯；12—乙酸苯基乙基酯；13—己酸；14—辛酸；15—癸酸；16—十二酸；17—十四酸

色谱柱：SP-1000，25m×0.2mm

柱　温：60℃→200℃，4℃·min^{-1}

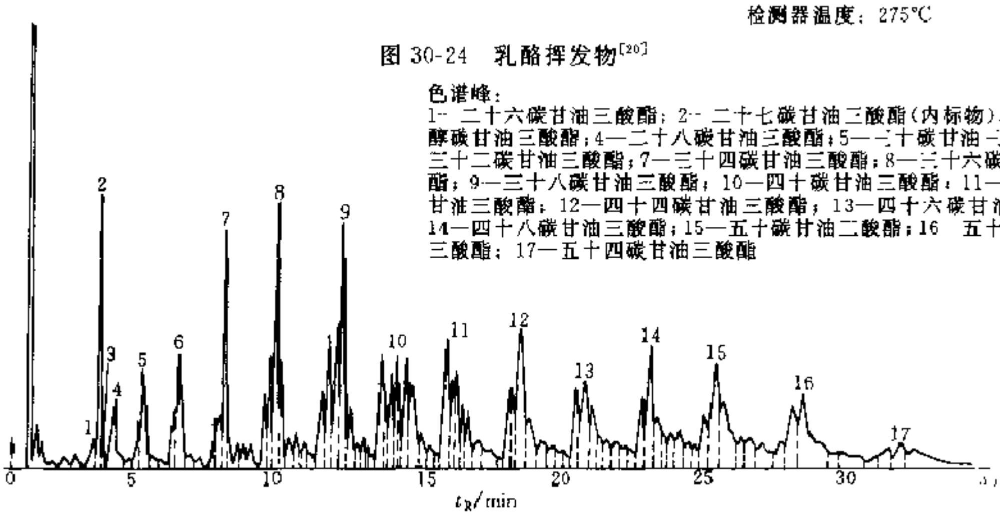
载　气：He

检测器：FID

气化室温度：275℃

检测器温度：275℃

图 30-24　乳酪挥发物[20]



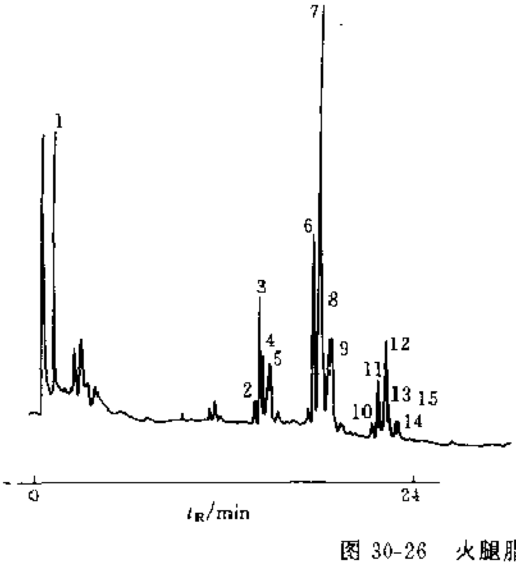
色谱峰：

1—二十六碳甘油三酸酯；2—二十七碳甘油三酸酯(内标物)；3—胆固醇碳甘油三酸酯；4—二十八碳甘油三酸酯；5—三十碳甘油三酸酯；6—三十二碳甘油三酸酯；7—三十四碳甘油三酸酯；8—三十六碳甘油三酸酯；9—三十八碳甘油三酸酯；10—四十碳甘油三酸酯；11—四十二碳甘油三酸酯；12—四十四碳甘油三酸酯；13—四十六碳甘油三酸酯；14—四十八碳甘油三酸酯；15—五十碳甘油三酸酯；16—五十二碳甘油三酸酯；17—五十四碳甘油三酸酯

图 30-25　乳酪中甘油三酸酯[21]

色谱柱：TAP-CB，25m×0.25mm，d_f=0.10μm　　载　气：He

柱　温：280℃(1min)→350℃，3℃·min^{-1}　　进样方式：程序升温分流(从 50℃在 15s 升至 250℃)



色谱峰❶：1—胆固醇；2—C16：0-C16：0-C18：0；3—C16：0-C16：0-C18：1；4—C16：0-C16：1-C18：1；5—C16：0-C16：0-C18：2；6—C16：0-C18：0-C18：1；7—C16：0-C18：1-C18：1；8—C16：0-C18：0-C18：2；9—C16：0-C18：1-C18：2；10—C18：0-C18：0-C18：1；11—C18：0-C18：1-C18：1；12—C18：1-C18：1-C18：1；13—C18：0-C18：1-C18：2；14—C18：1-C18：1-C18：2；15—C18：1-C18：2-C18：2

色谱柱：联苯二甲基硅氧烷，25m×0.2mm，d_f=0.1μm

柱　温：340℃→365℃，1℃·min^{-1}　　检测器：FID

载　气：H_2，60cm·s^{-1}　　气化室温度：380℃

图 30-26　火腿脂肪(甘油三酸酯)[22]

❶脂肪酸酯的符号　16：0—十六烷酸酯；18：0—十八烷酸酯；16：1—棕榈油酸酯；18：1—油酸酯；18：2—亚油酸酯

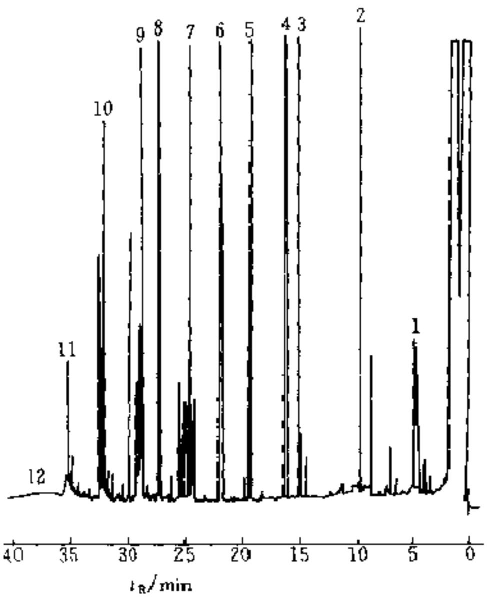


图 30-27　蔗糖式甘油酯[23]

色谱峰：1—甘油；2—月桂酸；3—单月桂酸甘油酯；4—内标；5—蔗糖；6—1,2-二月桂酸甘油酯+1,3-二月桂酸甘油酯；7—单月桂酸蔗糖酯；8—三月桂酸甘油酯；9—二月桂酸蔗糖酯；10—三月桂酸蔗糖酯；11—四月桂酸蔗糖酯；12—五月桂酸蔗糖酯
色谱柱：PS 264，10m×0.32mm
柱　温：70℃(4min)→400℃，10℃·min^{-1}
载　气：H_2，25ml·min^{-1}
检测器：FID
检测器温度：420℃

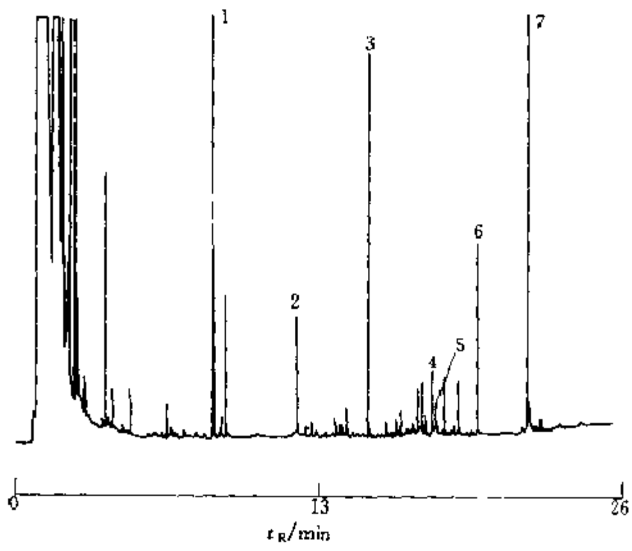


图 30-28　醋中多元醇(硅烷衍生物)[24]

色谱峰：1—丙三醇；2—赤藓醇；3—阿糖醇；4—甘露醇；5—山梨糖醇；6—肌醇；7—苯基-β-吡喃甙葡萄糖(内标)
色谱柱：SE-54，25m×0.32mm，d_f=0.4μm
柱　温：80℃(3min)→300℃(10min)，10℃·min^{-1}
载　气：H_2，2.1ml·min^{-1}
检测器：FID
气化室温度：300℃
检测器温度：300℃

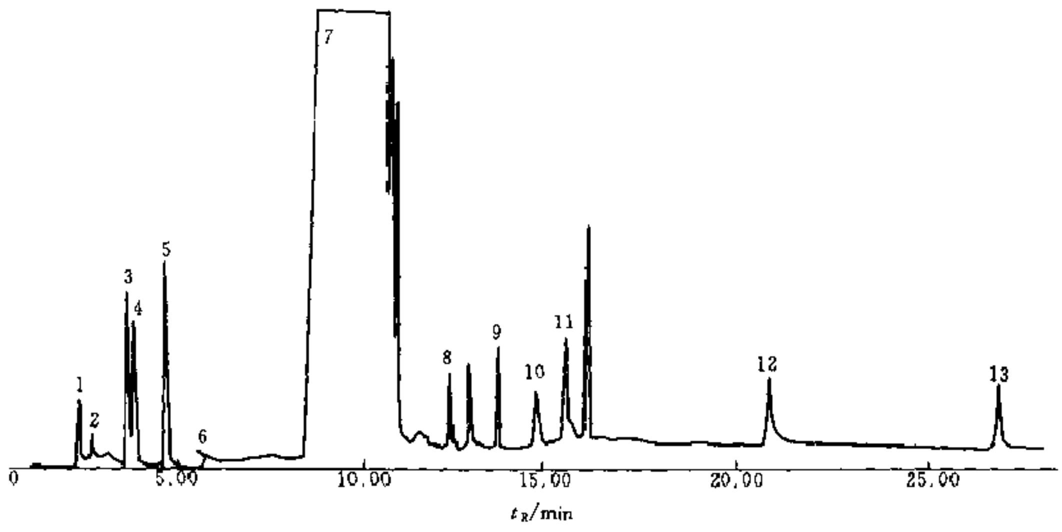


图 30-29　食用蟹味油[25]

色谱峰：1—水；2—乙醇；3—2-甲基-1,3-二噁烷；4—2-甲基-1,3-二噁烷异构体；5—三聚乙醛；6—乙酸；7—1,2-丙二醇；8—壬酸乙酯；9—癸酸乙酯；10—2-乙基-3-羟基吡喃-4-酮；11—甘油；12—十二酸乙酯；13—3-甲氧基-4-羟基苯甲醛
色谱柱：XE-60，25m×0.25mm，d_f=0.5μm
柱　温：80℃(10min)→140℃(8min)，20℃·min^{-1}→180℃(20min)，20℃·min^{-1}
载　气：He
检测器：MS

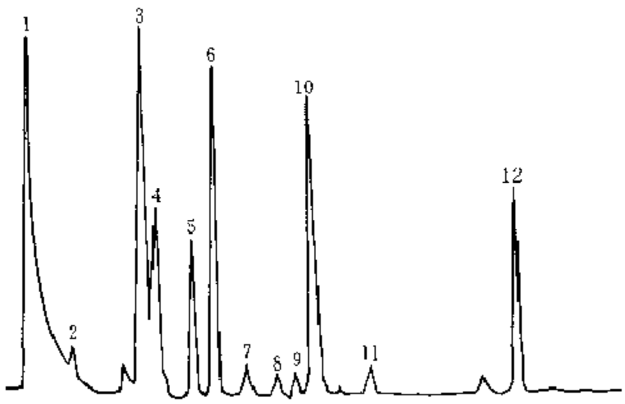


图 30-30　芥子苷酶降解产物[36]

色谱峰：1　1氯甲烷(溶剂)；2—异硫氰酸丙烯酯；3—异硫氰酸丁烯酯；4—3 甲基-3 羟基戊腈；5　1,1'-亚甲基氮杂环丁烷；6—5,6-环硫己腈；7—异硫氰酸异己基酯；8—5-甲硫基戊腈；9　异硫氰酸正己基酯；10—苯丙腈；11—6-甲硫基己腈；12—异硫氰酸苯乙酯

色谱柱：SP 1000，25m×0.25mm

柱　温：50°C(5min)→100°C(5min)，5°C·min⁻¹→150°C，5°C·min⁻¹

载　气：He，6.2ml·min⁻¹

检测器：MS

气化室温度：200°C

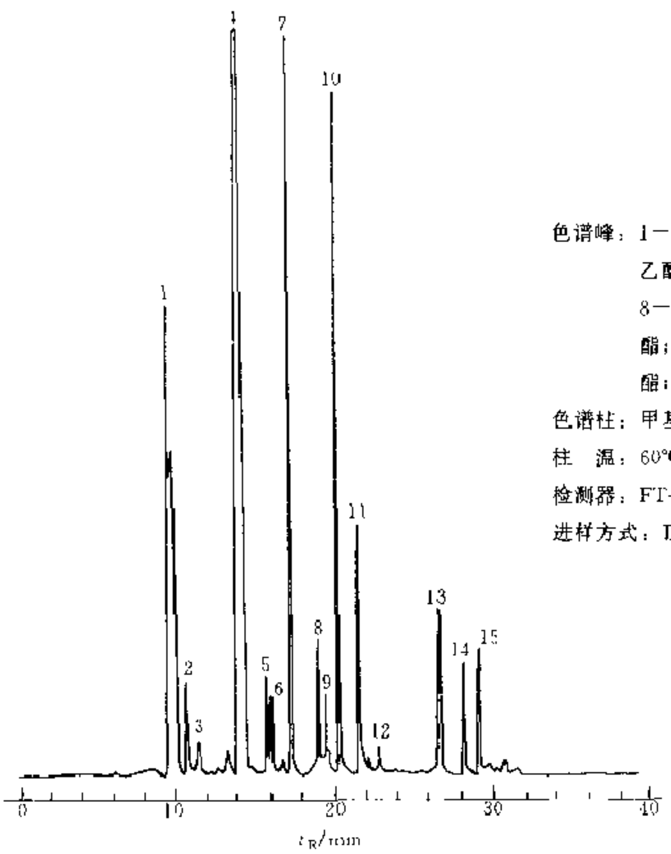


图 30-31　橡皮糖[37]

色谱峰：1—乙醇；2—丙酮；3　甲酸乙酯；4—乙酸乙酯；5—乙酸异戊(?)酯；6—二乙基(?)醚；7—丙酸乙酯；8—异丁酸(?)乙酯；9—乙酸异丁酯；10　丁酸乙酯；11—糠醛；2—不饱和化合物；13　丁烯酸乙酯；14　酯类；15　兰烯

色谱柱：甲基硅氧烷，100m×0.32mm

柱　温：60°C(5min)→260°C，8°C·min⁻¹

检测器：FT-IR

进样方式：顶空法

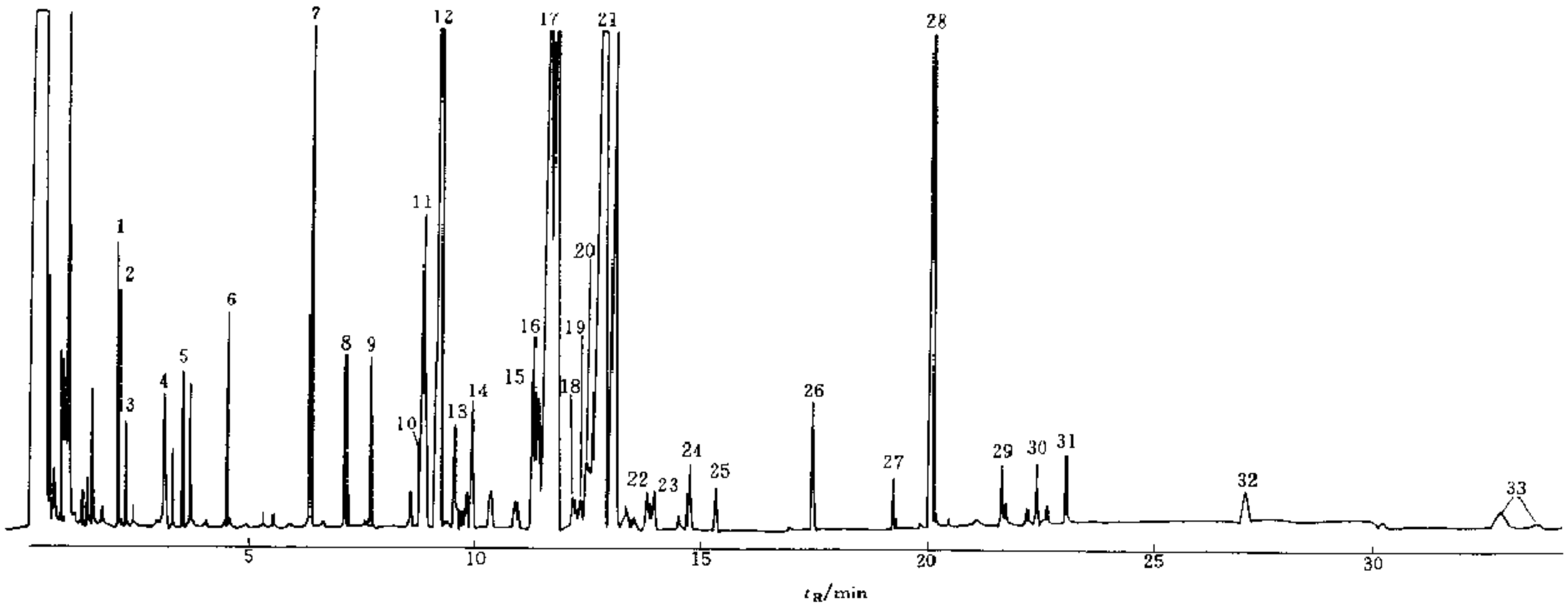


图 30-32 水果中常见的糖与酸类组分(TMS-衍生物)[28]

色谱峰：1—乙醇酸；2—乳酸；3—草酸；4—山梨酸；5—苯甲酸；6—丁二酸；7—苹果酸；8—庚二酸；9—酒石酸；10—阿拉伯糖；11—木糖；12—柠檬酸+异柠檬酸；13—鼠李糖；14—奎尼酸；15—甘露糖醇；16—山梨糖醇；17—果糖；18—抗坏血酸；19—半乳糖；20—甘露糖；21—葡萄糖；22—十六烷酸；23—咖啡酸；24—亚油酸；25—十八烷酸；26—二十烷酸；27—二十二烷酸；28—蔗糖；29—麦芽糖；30—绿原酸；31—异麦芽糖；32—棉籽糖；33—麦芽三糖

色谱柱：CP-Sil 5CB，10m×0.25mm，d_f=0.12μm

柱　温：60℃(1min)→84℃，12℃·min^{-1}→168℃(4min)，14℃·min^{-1}→270℃(12min)，10℃·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：300℃

检测器温度：300℃

第二节　烟、酒与饮料色谱图

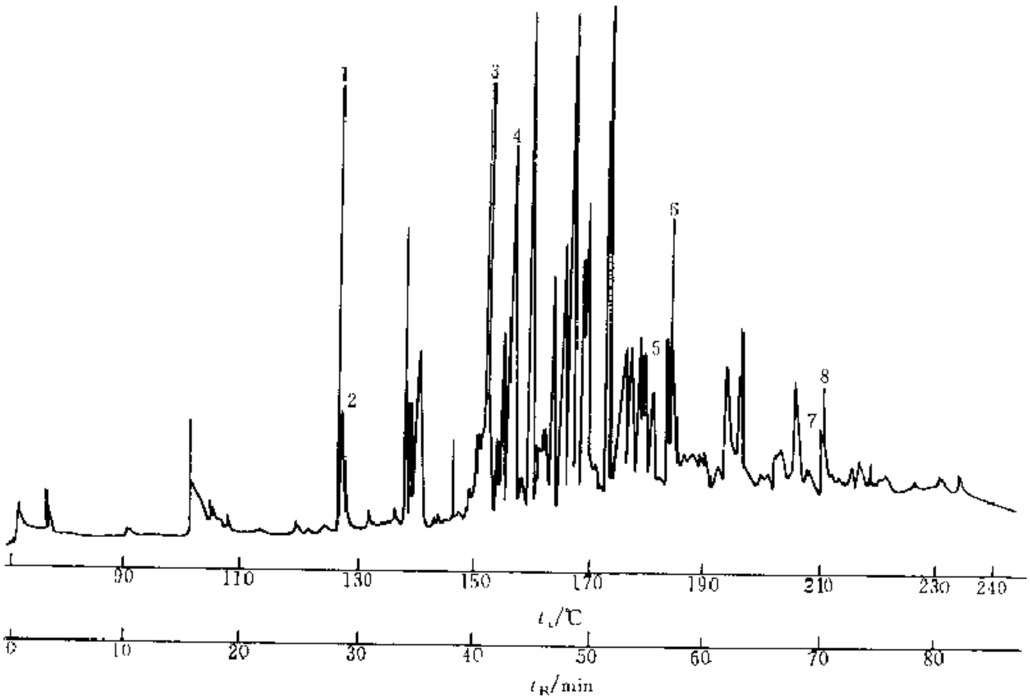
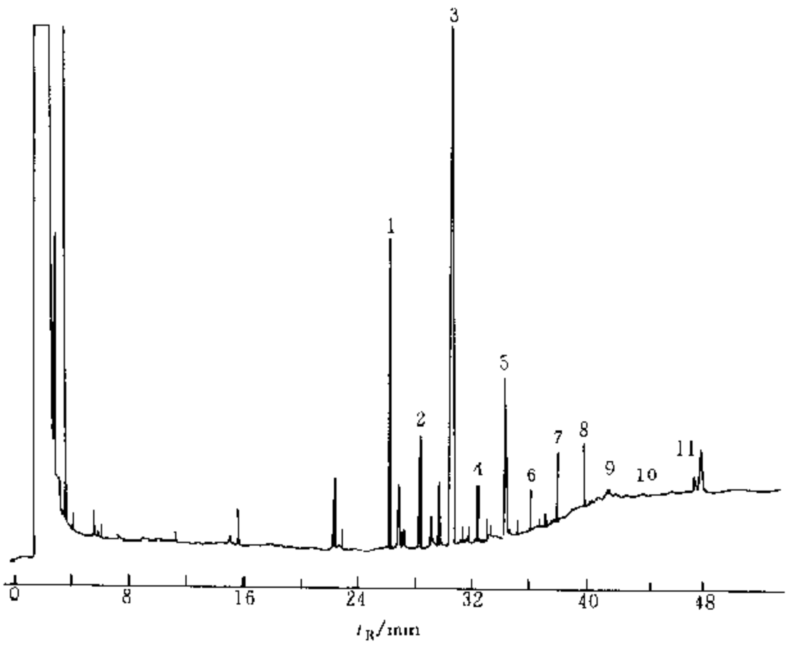


图 30-33　香烟烟气冷凝液[29]

色谱峰：1—菲；2—蒽；3—荧蒽；4—芘；5—苯并[a]蒽；6—䓛；7—苯并[e]芘；8—苯并[a]芘
色谱柱：SE-52，11m×0.26mm
柱　温：70℃→240℃
载　气：He
气化室温度：250℃



色谱峰：1—正二十醇；2—正二十一醇；3—正二十二醇；4—正二十三醇；5—正二十四醇；6—正二十五醇；7—正二十六醇；8—正二十七醇；9—正二十八醇；10—正二十九醇；11—正三十醇
色谱柱：SE-54，25m×0.3mm
柱　温：130℃→150℃，20℃·min^{-1}→300℃，4℃·min^{-1}
载　气：H_2，30cm·s^{-1}
检测器：FID

图 30-34　烟草中脂肪醇(TMS 衍生物)[32]

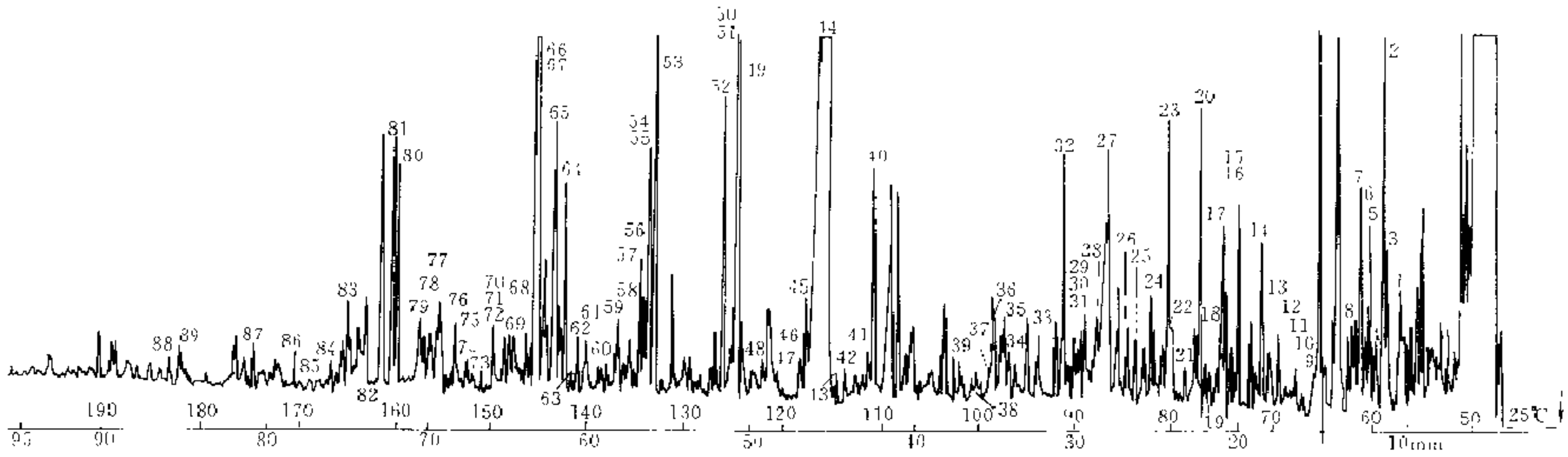


图 30 35 香烟烟气半挥发物[44]

色谱峰：1—2,6-二甲基吡啶；2—苎烯；3—吡啶；4—甲基吡嗪；5—正十一烷；6—苯甲醚；7—2,5-二甲基吡啶；8—3-甲基吡啶；9—2,4-二甲基吡啶；10—2,3-二甲基吡啶；11—正十二烷；12—茚满；13—2-乙烯基吡啶；14—糠醇；15—茚；16—丁烯；17—吡咯；18—苯并呋喃；19—2-乙酰呋喃；20—苯甲醛；21—正十三烷；22—茶满；23—1-十三碳烯；24—5-甲基呋喃；25—苄腈；26—二氢苯并呋喃；27—丙二醇；28—乙酰甲基呋喃；29—苯乙酮；30—正十四烷；31—对甲苯甲醛；32—糠醇；33—1-十四碳烯；34—薄荷醇；35—3-氰基吡啶；36—萘；37—苯基乙基甲酮；38—苯胺；39—正十五烷；40—2-甲基萘；41—苯甲醇；42—1-甲基萘；43—正十六烷；44—尼古丁；45—喹啉；46—2,6-二甲苯酚；47—1-甲基吲哚；48—联苯；49—酚；50—正十七烷；51—1,6-二甲基萘；52—邻甲酚；53—对甲酚；54—间甲酚；55—邻乙苯酚；56—2,5-二甲基酚；57—2,4-二甲苯酚；58—正十八烷；59—芪；60—1,2-二甲基吲哚；61—危烯；62—3,5-二甲酚；63—$C_{20}H_{17}$；64—3-乙基酚；65—4-乙基酚；66—新植二烯；67—3,4-二甲酚；68—正十九烷；69—2,3,5-三甲酚；70—邻苯二酚；71—丁子香酚；72—咔唑；73—7-甲基吲哚；74—芴；75—茶碱烯；76—邻甲氧基酚；77—正二十烷；78—丙三醇；79—异丁子香酚；80—乙烯基酚；81—吲哚；82—香豆素；83—3-甲基吲哚；84—2-甲基吲哚；85—5-甲基吲哚；86—反茋；87—正廿二烷；88—蒽；89—菲

色谱柱：Emulphor O，55m×0.35mm

柱　温：25℃→190℃

检测器：FID

色谱峰：1—尼古丁；2 -2 甲基咪唑；3 2-乙基咪唑；4—2,4(5)-二甲基咪唑；5，8，11 -C_3H-咪唑；6—咪唑；7，9—4(5)-甲基咪唑；10—乙基 4(5)-咪唑；12- 3-羟基吡啶；13—甲基-3-羟基吡啶

色谱柱：Carbowax 20M，25m×0.22mm

柱　温：120℃(2min)→190℃，2℃・min^{-1}

载　气：He

检测器：MS

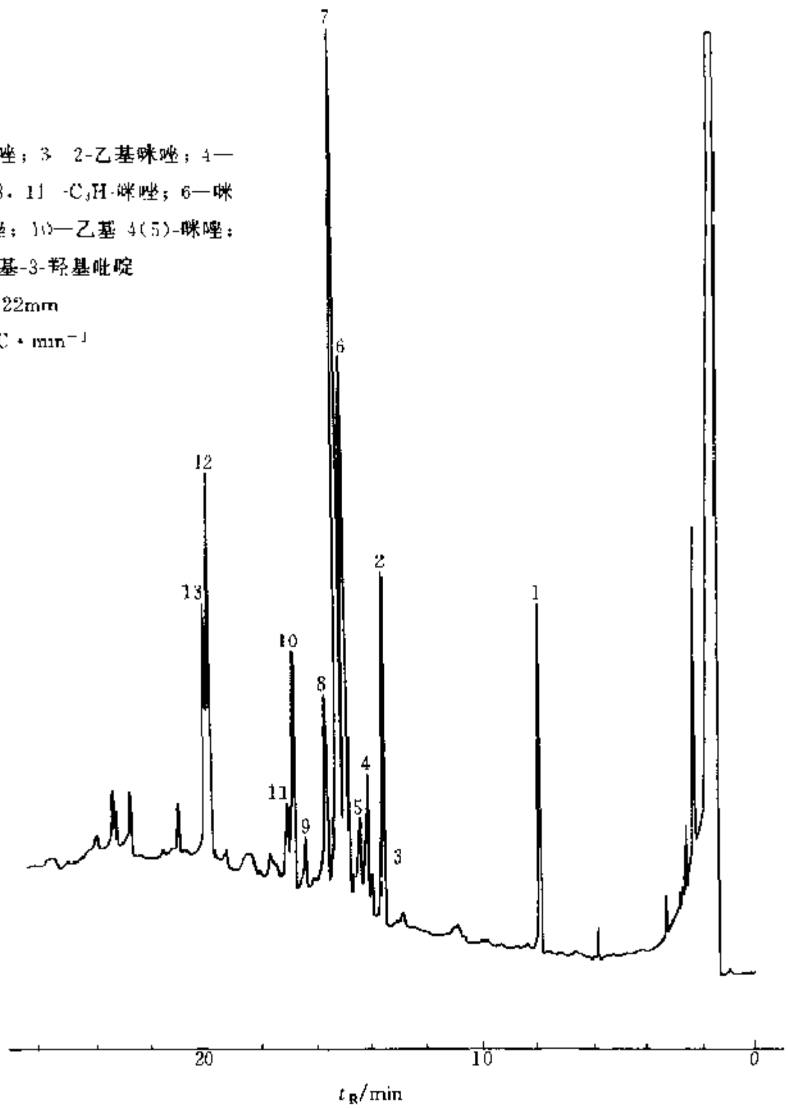
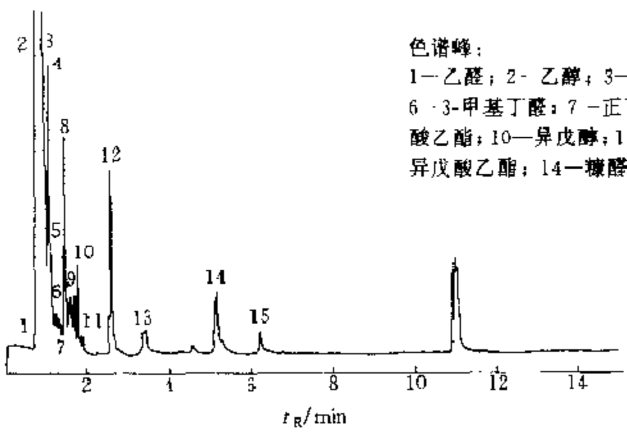


图 30-36　香烟冷凝物[30]



色谱峰：

1—乙醛；2- 乙醇；3—正丙醇；4—乙酸乙酯；5—异丁醇；6 -3-甲基丁醛；7 —正丁醇；8—1，1-二乙氧基乙烷；9—丙酸乙酯；10—异戊醇；11—异丁酸乙酯；12 -丁酸乙酯；13—异戊酸乙酯；14—糠醇；15—己酸乙酯

图 30-37　茅台酒香气[34]

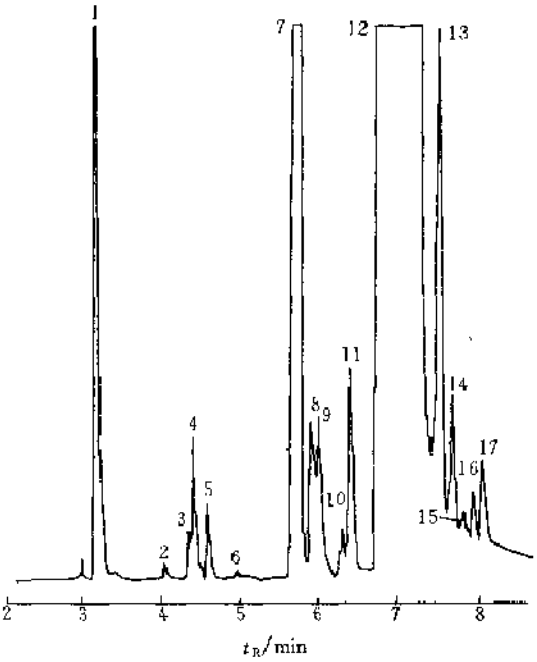
色谱柱：HP-1，12.5m×0.2mm

柱　温：50℃

载　气：He

检测器：MS

气化室温度：250℃



色谱峰：1—乙醛；2—正丙醛；3—异丁醛；4—丙酮；5—甲酸乙酯；6—二乙氧基甲烷；7—乙酸乙酯＋乙缩醛；8—甲醇；9—2-丁酮；10—2-甲基丁醛；11—异戊醛；12—乙醇；13—丙酸乙酯；14—异丁酸乙酯；15—未知物；16—乙酸丙酯；17—2-戊酮

色谱柱：HP INNOWax，30m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱　温：40℃(2min)→80℃，5℃·min^{-1}→260℃(10min)，10℃·min^{-1}

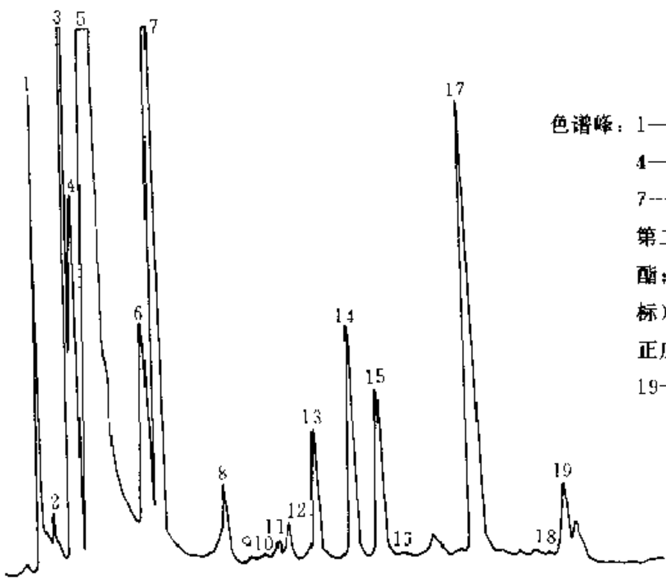
载　气：N_2，21.9cm·s^{-1}；分流比＝33：1

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：280℃

图 30-38　茅台酒低沸点组分[35]



色谱峰：1—乙醛；2—甲酸乙酯；3—乙酸乙酯；4—乙缩醛＋甲醇；5—乙醇；6—仲丁醇；7—正丙醇＋丁酸乙酯；8—异丁醇；9—第二戊醇；10—乙酸异戊酯；11—戊酸乙酯；12—正丁醇；13—乙酸正戊酯(内标)；14—异戊醇；15—己酸乙酯；16—正戊醇；17—乳酸乙酯；18—辛酸乙酯；19—糠醛

图 30-39　茅台酒醇与酯组分[35]

色谱柱：10% PEG20M，担体 Shimalite(60 目～80 目)，3m×2mm　　载　气：N_2，28 ml·min^{-1}

柱　温：60℃(3min)→125℃(5min)，5℃·min^{-1}　　检测器：FID

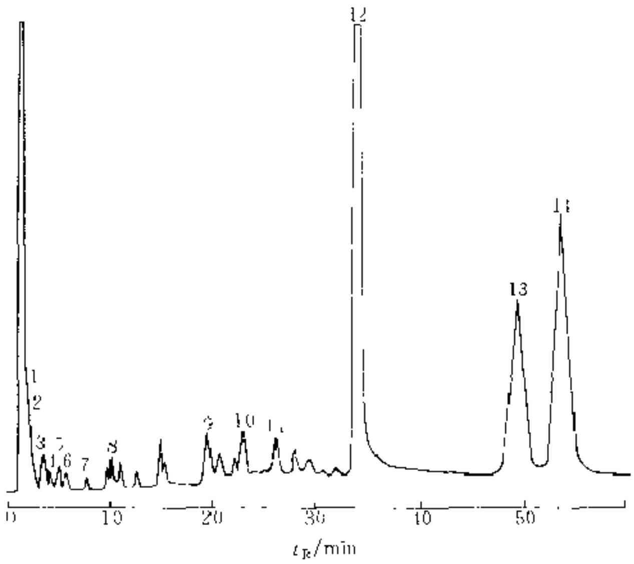


图 30-40 茅台酒[16]

色谱峰：1—乙酸乙酯+丙酸乙酯；2—丁酸乙酯；3—异丁醇；4—戊酸乙酯；5—异戊醇；6—己酸乙酯；7—庚酸乙酯；8—辛酸乙酯；9—苯乙酸乙酯；10—苯乙醇；11—十二酸乙酯；12—十六酸乙酯；13—油酸乙酯；14—亚油酸乙酯

色谱柱：10% FFAP—1% H_3PO_4，Chromosorb W NAW (80 目～100 目)，3m×2mm

柱 温：90℃→190℃ (35min)，4℃·min⁻¹　　气化室温度：280℃

载 气：N_2　　检测器温度：270℃

检测器：FID

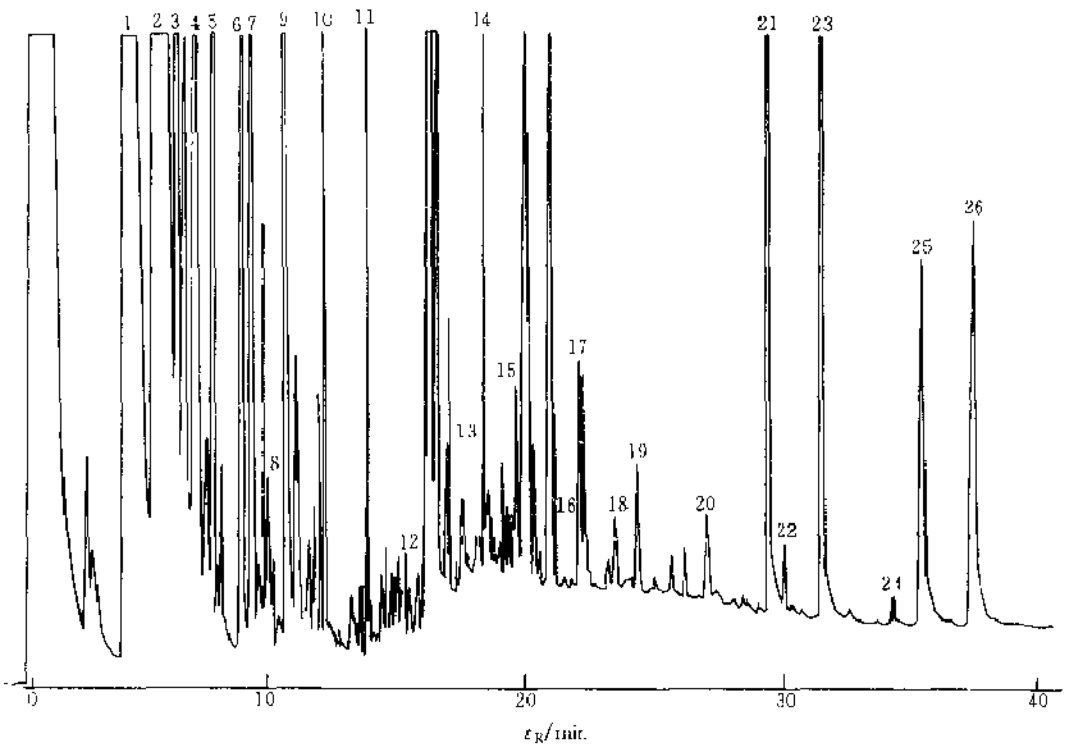


图 30-41 茅台酒游离有机酸[18]

色谱峰：1—醋酸；2—丙酸；3—异丁酸；4—丁酸；5—异戊酸；6—戊酸；7—2-乙基丁酸(内标 1)；8—异己酸；9—己酸；10—庚酸；11—辛酸；12—壬酸；13—癸酸；14—十一酸(内标 2)；15—苯甲酸；16—十三酸；17—苯乙酸；18—苯丙酸；19—肉豆蔻酸；20—十五酸；21—棕榈酸；22—棕榈油酸；23—十七酸(内标 3)；24—硬脂酸；25—油酸；26—亚油酸

色谱柱：FFAP，25m×0.20mm

柱 温：120℃(2min)→240℃(30min)，8℃·min⁻¹

检测器：FID

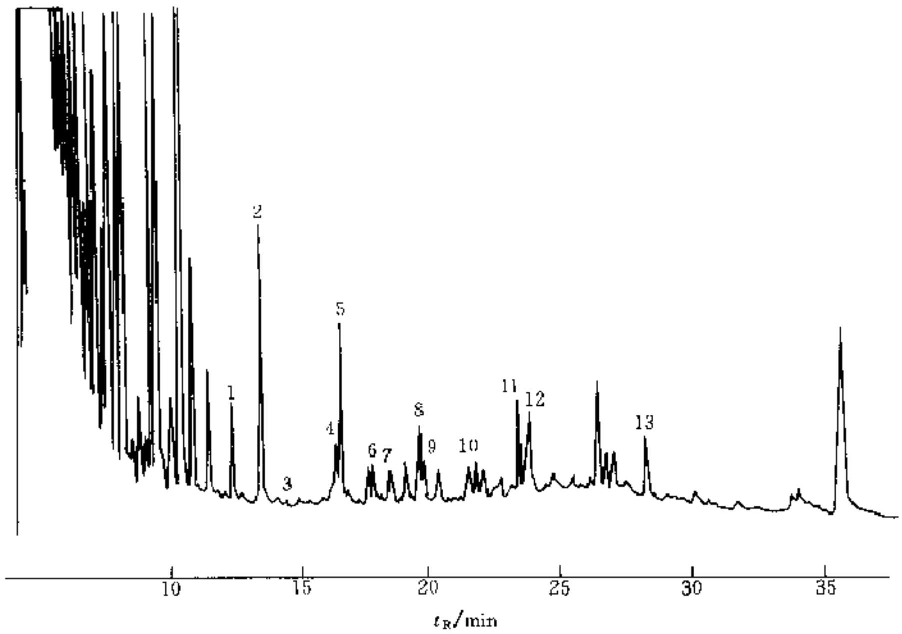


图 30-42　茅台酒酚类化合物(TMS 衍生物)[37]

色谱峰：1—对羟基苯甲醛；2—苯丙酸；3—间羟基苯乙酮；4—水杨酸；5—香草醛；6—邻羟基苯乙酸；7—邻羟基苯丙酸；8—对羟基苯甲酸；9—对羟基苯乙酸；10—邻苯二甲酸；11—对羟基苯丙酸；12—香草酸；13—4-羟基-3-甲氧基苯丙酸

色谱柱：SE-30，30m×0.25mm　　检测器：FID

柱　温：160℃→230℃，3℃·min⁻¹　　气化室温度：260℃

载　气：N_2，18.5cm·s⁻¹　　检测器温度：260℃

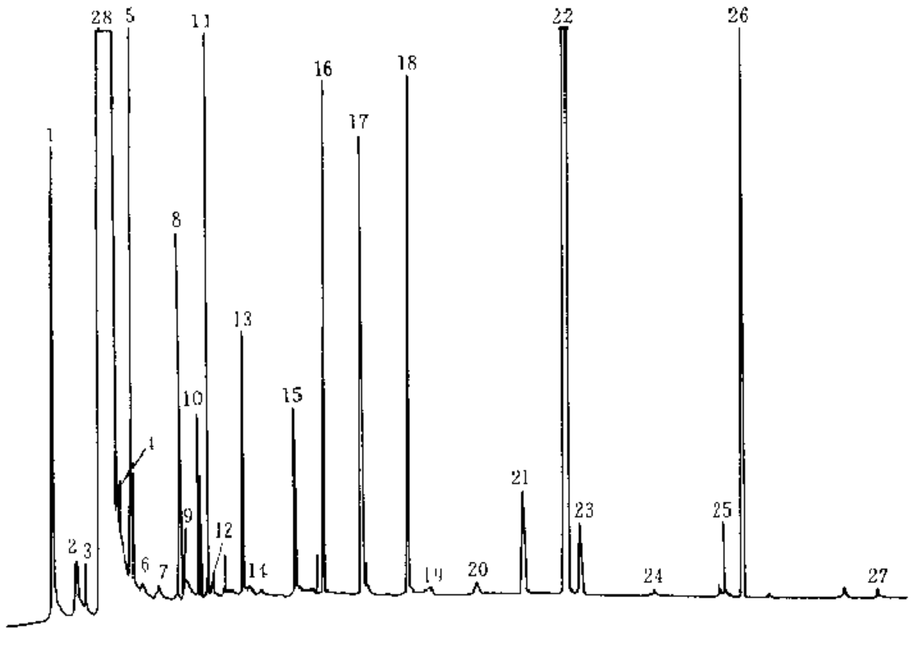


图 30-43　泸州特曲酒[39]

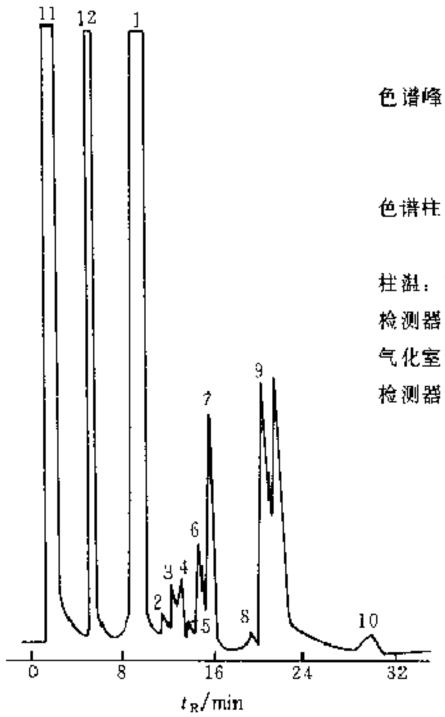
色谱峰：1—乙醛；2—甲醇；3—甲酸乙酯；4—异丙醇；5—乙酸乙酯；6—丙酸甲酯；7—双乙酰；8—正丙醇；9—乙酸叔丁酯；10—仲丁醇；11—乙缩醛；12—丙酸乙酯；13—异丁醇；14—异丁酸乙酯；15—正丁醇；16—丁酸乙酯；17—乙酸丁酯；18—异戊醇；19—醋嗡；20—正戊醇；21—戊酸乙酯；22—乳酸乙酯；23—乙酸戊酯；24—糠醛；25—正己醇；26—己酸乙酯；27—庚酸乙酯；28—乙醇

色谱柱：20% 苯二甲酸二壬酯－7% Tween-80，60m×0.3mm

柱　温：60℃(8min)→90℃(32min)，4℃·min^{-1}

载　气：N_2　　气化室温度：180℃

检测器：FID　　检测器温度：180℃



色谱峰：1—乙醛；2—丙酮；3—丙醛；4—异丁醛；5—丁酮；6—丁二酮；7—异戊醛；8—正己醛；9—糠醛；10—苯甲醛；11—溶剂；12—蒽

色谱柱：5% SE-30，硅烷化 120 担体（60 目～80 目），1.5m×3mm

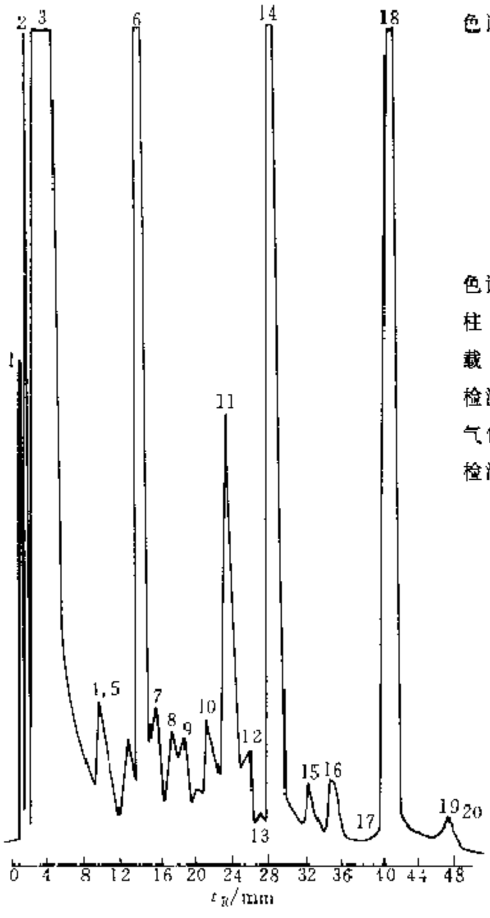
柱温：190℃→240℃，3℃·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：280℃

检测器温度：250℃

图 30-44　茅台酒羰基化合物（二硝基苯肼衍生物）[35]



色谱峰：1—甲醇；2—乙醛；3—乙醇；4—正丙醇；5—第三丁醇；6—乙酸乙酯+仲丁醇；7—异丁醇；8—正丁醇；9—第三戊醇；10—第二戊醇+丙酸乙酯；11—异戊醇；12—正戊醇；13—糠醛；14—乳酸乙酯+丁酸乙酯；15—正己醇；16—戊酸乙酯+乙酸正戊酯；17—庚醇；18—己酸乙酯；19—辛醇；20—庚酸乙酯

色谱柱：上试 402 担体（80 目～100 目），2m×2mm

柱　温：80℃(1min)→200℃，3℃·min^{-1}

载　气：N_2，25mL·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：200℃

检测器温度：200℃

图 30-45　泸州特曲酒醇与酯组分（一）[35]

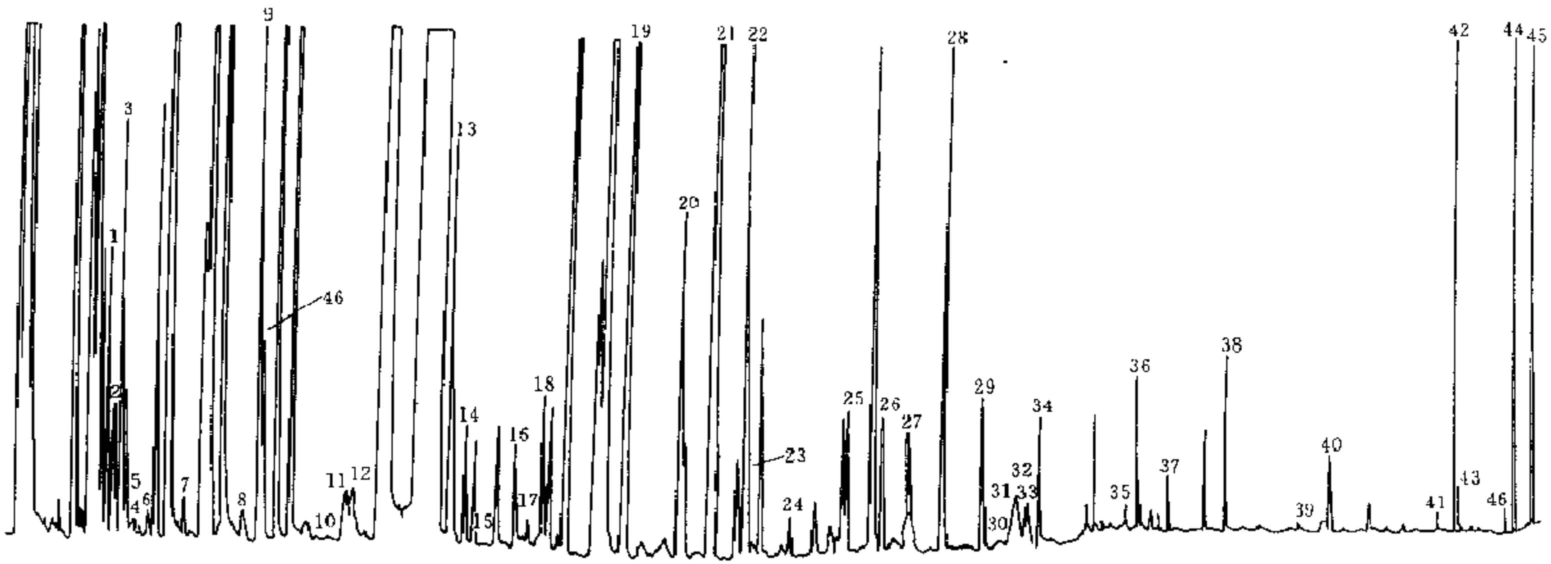


图 30-16 泸州特曲酒醇与酯组分(二)[C]

色谱峰：1—丙酸乙酯；2 异丁酸乙酯；3 乙酸丙酯；4 乙酸异丁酯；5 异戊酸乙酯；6 叔戊醇；7—叔己醇；8—戊醇-3；9—乙酸异戊酯；10—乙酸正戊酯；11 丙酸异戊酯；12 仲己醇；13 丁酸戊酯；14 乙酸正己酯；15 环戊醇；16 乙酰甲基甲醇；17 戊酸丁酯；18 异己醇；19 乙酸正庚酯；20—环己醇；21—辛酸乙酯；22 己酸异戊酯；23 庚醇；24—乙酰乙酸乙酯；25 壬酸乙酯；26 辛酸；27 乳酸异戊酯；28 2，3-丁二醇；29—丁二酸二甲酯；30 癸酸己酯；31 苯甲酸乙酯；32—糠醇；33—壬醇；34—丁二酸二乙酯；35—癸醇；36—苯乙酸乙酯；37—月桂酸乙酯；38—β苯乙醇；39—月桂醇；40—肉豆蔻酸乙酯；41—肉豆蔻醇；42 棕榈酸乙酯；43—肉桂醇；44—油酸乙酯；45—丁酸丙酯；46—十八酸乙酯

色谱柱：PEG 20M，50m×0.33mm

柱 温：70℃(4min)→180℃，4℃·min^{-1}

载 气：N_2，16cm·s^{-1}

检测器：FID

气化室温度：220℃

检测器温度：220℃

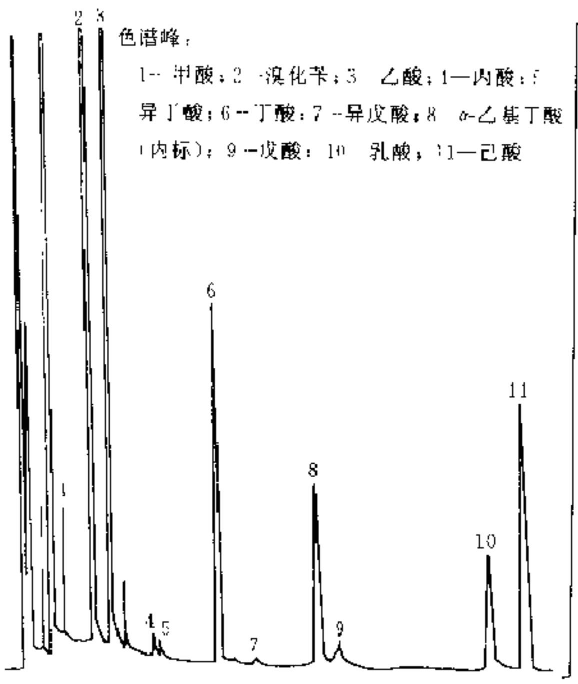


图 30-47 泸州特曲酒有机酸组分(溴化苄衍生物)

色谱柱：新戊二醇癸二酸聚酯，50m×0.3mm
柱 温：150℃ 气化室温度：250℃
载 气：N_2，18cm·s^{-1} 检测器温度：250℃
检测器：FID

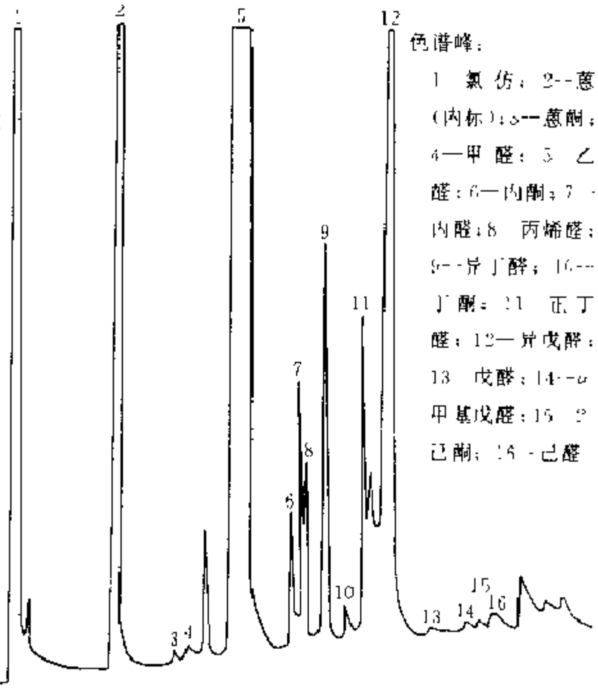


图 30-48 泸州特曲酒羰基化合物(苯腙衍生物)

色谱柱：SE-30，60m×0.3mm
柱 温：190℃(4min)→210℃，4℃·min^{-1}
载 气：N_2，0.8 ml·min^{-1} 气化室温度：280℃
检测器：FID 检测器温度：280℃

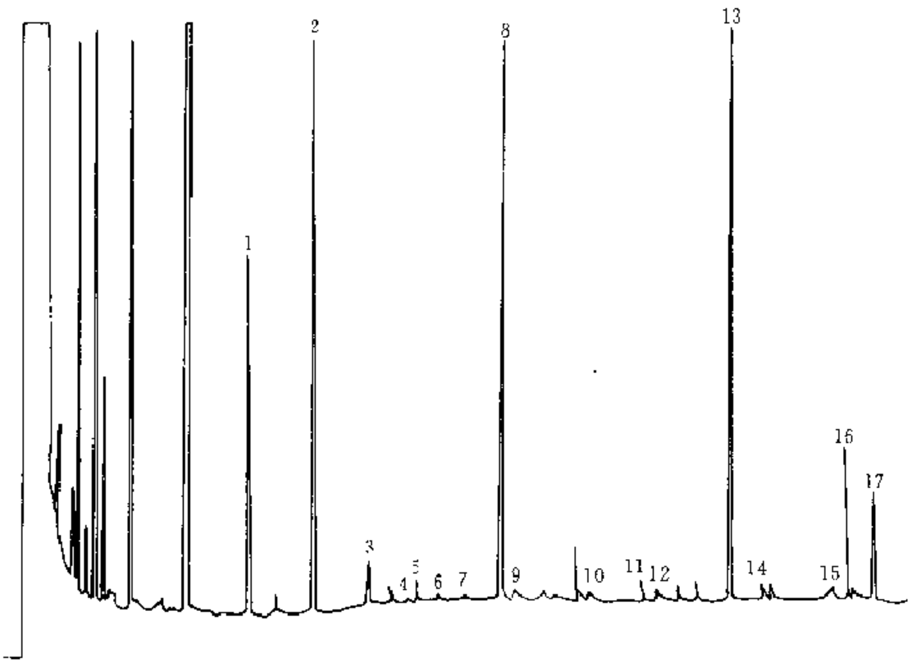


图 30-49 泸州特曲酒有机酸组分(甲酯衍生物)[35]

色谱峰：1—庚酸；2—辛酸；3—壬酸；4—丁二酸；5—癸酸；6—苯甲酸；7—异丁烯二酸；8—苯乙酸衍生试剂；9—月桂酸；10—阿魏酸；11—十四酸；12—肉桂酸；13—棕榈酸；14—十六碳烯酸；15—十八酸；16—油酸；17—亚油酸

色谱柱：SE-30，60m×0.3mm 检测器：FID
柱 温：80℃(8min)→200℃，8℃·min^{-1} 气化室温度：250℃
载 气：N_2 检测器温度：250℃

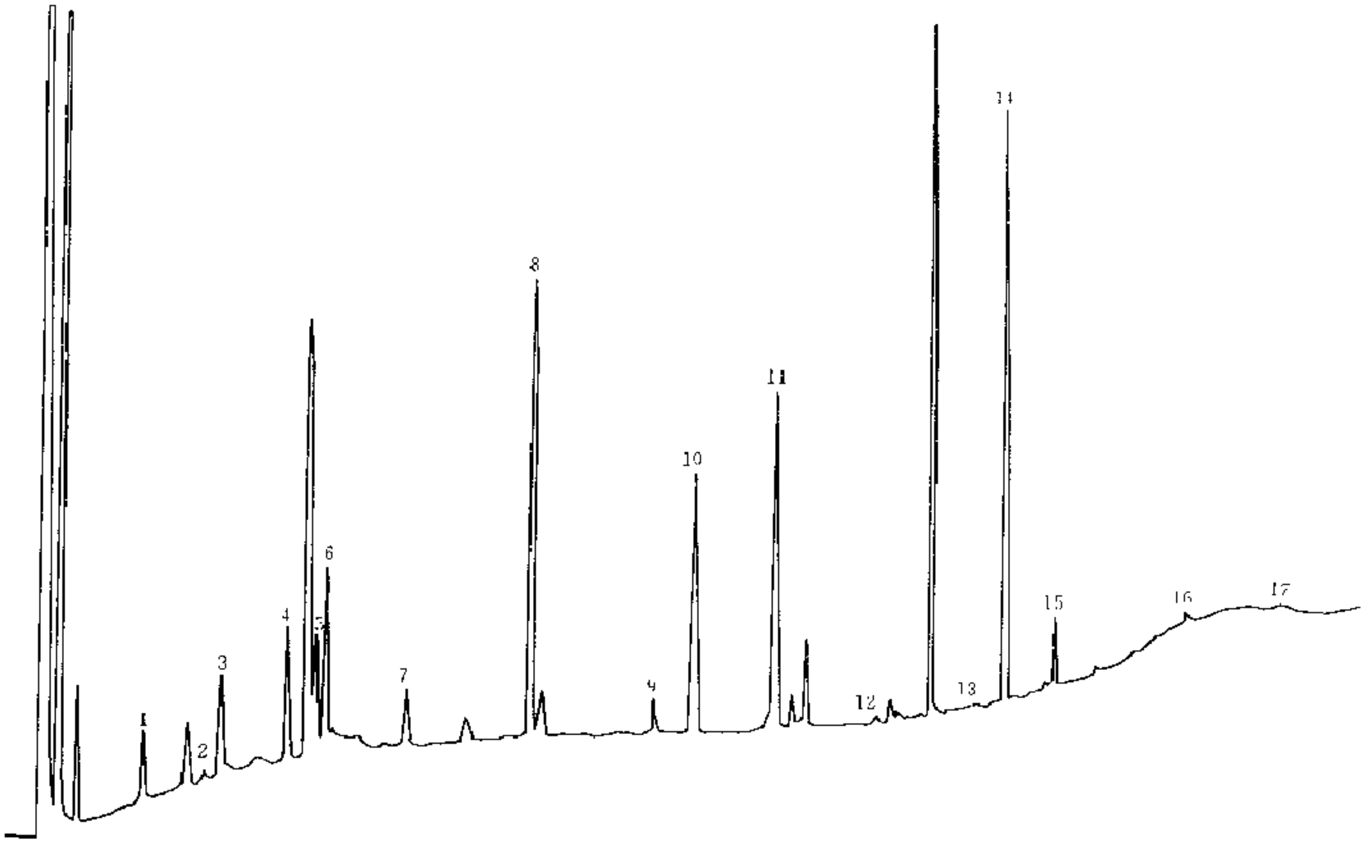


图 30-50　汾酒中酸类[16]

色谱峰：1—乙酸；2—丙酸；3—异丁酸；4—正丁酸；5—2甲基丁酸；6—异戊酸；7—正戊酸；8—正己酸；9—正庚酸；10—乳酸；11—辛酸；12—壬酸；13—癸酸；11—丁二酸；15—苯甲酸；16—苯乙酸；17—苯丙酸

色谱柱：Carbowax 20M SCOT 柱，38m×0.3mm

柱　温：60°C(4min)→200°C，3°C·min^{-1}

检测器：FID

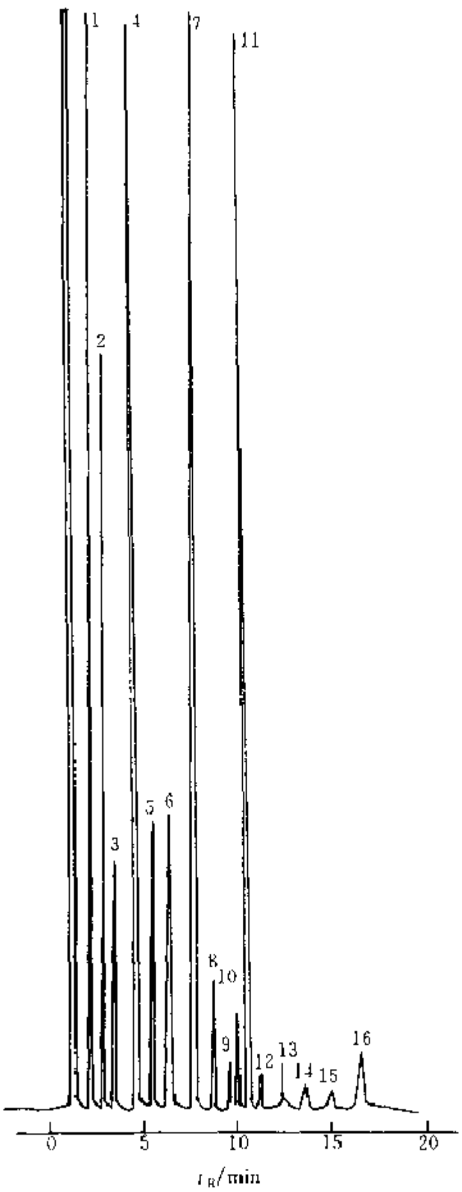


图 30-51 董酒中羧酸[41]

色谱峰：1—乙酸；2—丙酸；3—异丁酸；4—丁酸；5—异戊酸；6—戊酸；7—己酸；8—庚酸；9—辛酸；10—山梨酸（内标）；11—壬酸；12—癸酸；13—月桂酸；14—肉豆蔻酸；15—棕榈酸；16—硬脂酸

色谱柱：FFAP，25m×0.32mm，d_f=2μm

柱　温：70°C（5min）→210°C（6min），10°C · min^{-1}

载　气：N_2，14cm · s^{-1}

检测器：FID

气化室温度：300°C

检测器温度：280°C

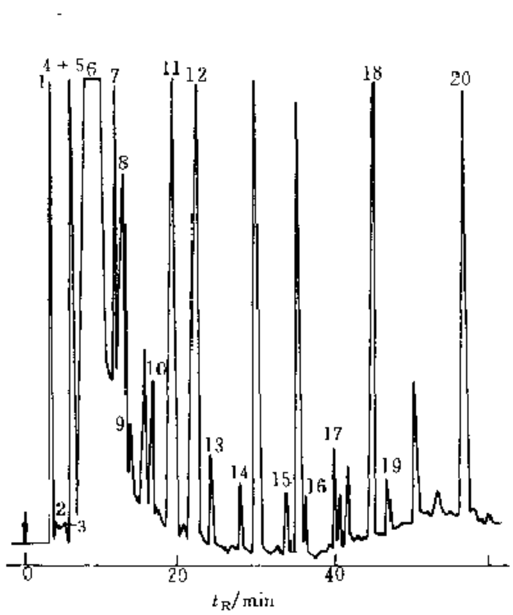


图 30-52 湘泉酒[42]

色谱峰：1—乙醛；2—甲酸乙酯；3—异丁醛；4—乙酸乙酯；5—乙缩醛；6—乙醇；7—仲丁醇；8—丁酸乙酯；9—正丙醇；10—异丁醇；11—正丁醇；12—异戊醇；13—正戊醇；14—庚酸乙酯；15—辛酸乙酯；16—糠醛；17—丙酸；18—丁酸；19—异戊酸；20—己酸

色谱柱：PEG-20M，50m×0.25mm

柱　温：45°C（5min）→160°C（25min），2.5°C · min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FID

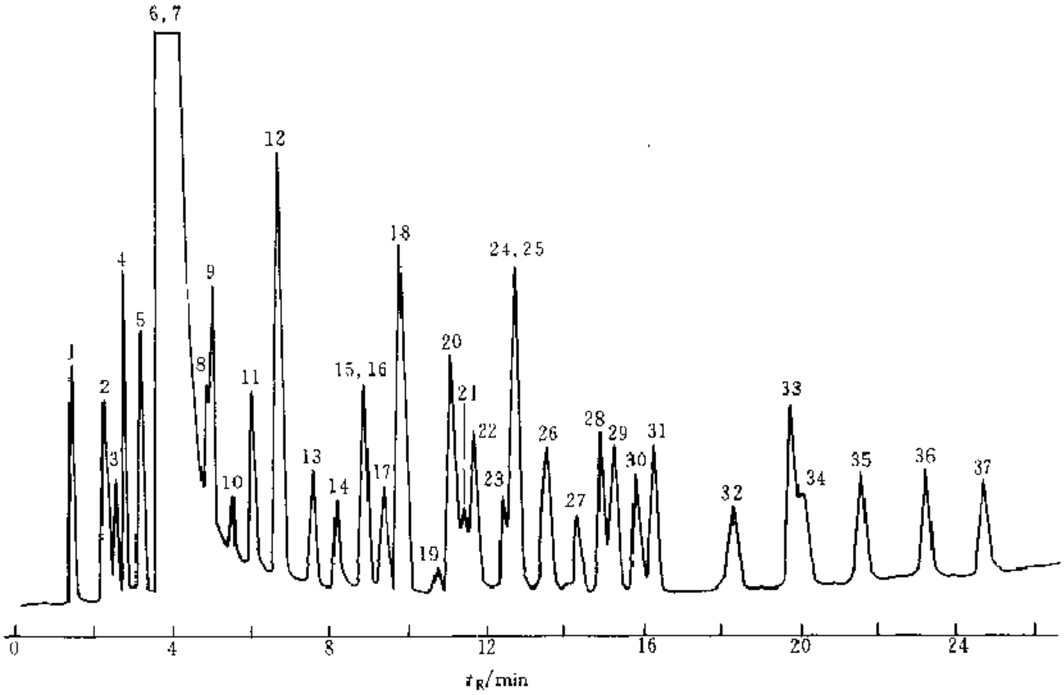


图 30-53　酒精饮料[45]

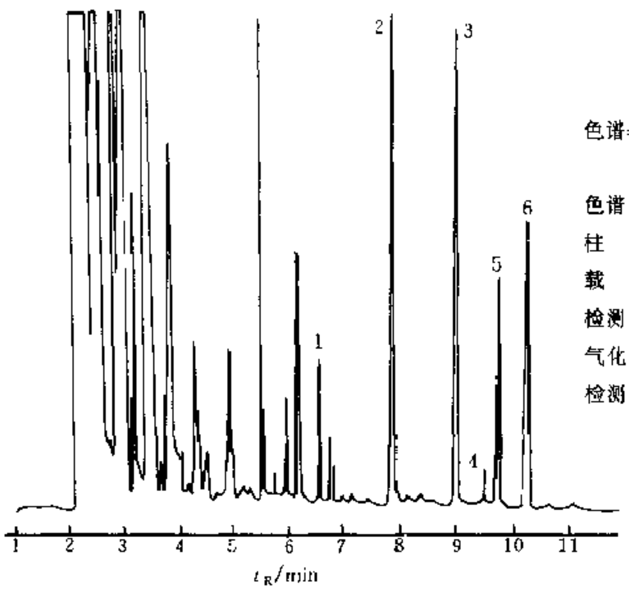
色谱峰：1—乙醛；2—甲醇；3—丙醛；4—丙酮；5—乙酸甲酯；6—乙醇；7，18—异丁醇；8—丁醛；9—异丙醇；10—乙酸乙酯；11—双乙缩醛；12—正丙醇；13—异丙醛；14—仲丁醇；15—戊醛；16—丙酸乙酯；17—乙酸丙酯；19—乙缩醛；20—丁醇；21—异丁酸乙酯；22—3-甲基-2-丁醇；23—3-戊醇；24—2-戊醇；25—乙酸异丁酯；26—丁酸乙酯；27—乙酸丁酯；28—2-甲基-1-戊醇；29—1-甲基-1-戊醇；30—乙酸；31—戊醇；32—乙酸异戊酯；33—呋喃；34—丙酸；35—己醇；36—异丁酸；37—丁酸

色谱柱：6.6% PEG-20M，Carbopack B AW（80 目～120 目），2m×2mm

柱　温：80℃→200℃，4℃·min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FID



色谱峰：1—肉豆蔻酸乙酯；2—棕榈酸乙酯；3—十 -酸；4—硬脂酸乙酯；5—油酸乙酯；6—亚油酸乙酯

色谱柱：FFAP，25m×0.32mm，d_f=0.25μm

柱　温：120℃(1min)→220℃(10min)，20℃·min^{-1}

载　气：N_2，19.6cm·s^{-1}；分流比＝32∶1

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：250℃

图 30-54　白酒高碳脂肪酸乙酯[33]

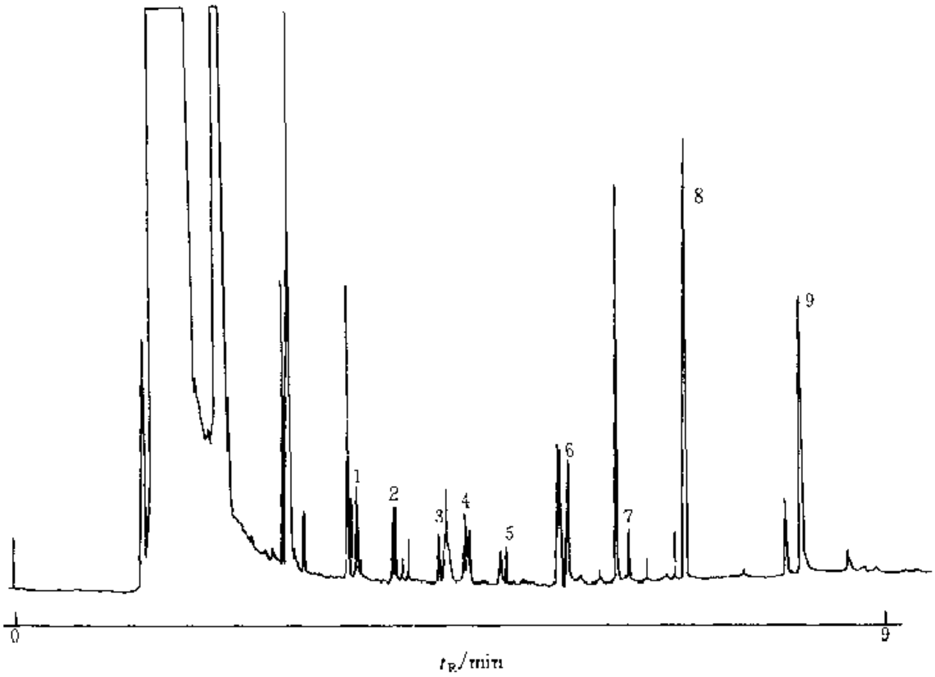


图 30-55　酒中微量游离酸[44]

色谱峰：1—乙酸；2—丙酸；3—丁酸；4—异戊酸；5—戊酸；6—己酸；7—庚酸；8—辛酸；9—癸酸

色谱柱：FFAP CB，25m×0.32mm，d_f=0.3μm

柱　温：60℃→105℃，25℃·min^{-1}→230℃，15℃·min^{-1}

载　气：H_2，40kPa

检测器：FID

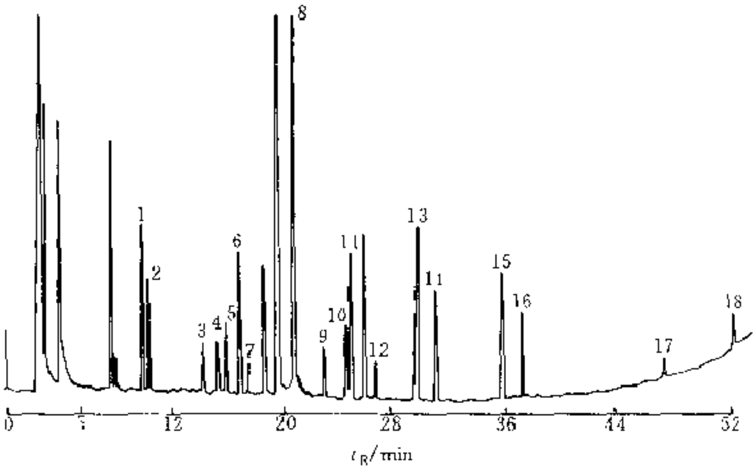


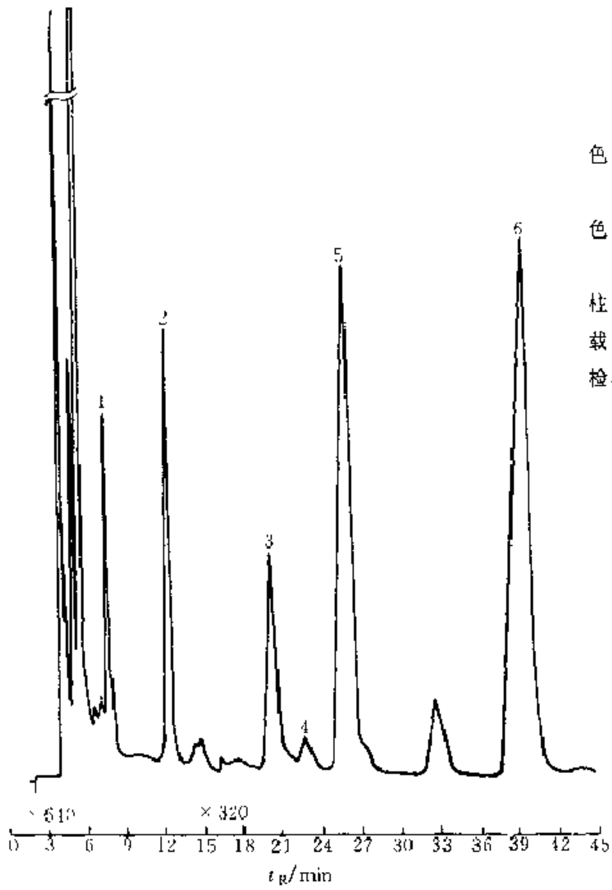
图 30-56　白酒基酒中氨基酸(N-HFB 异丙基衍生物)[45]

色谱峰：1—丙氨酸；2—甘氨酸；3—缬氨酸；4—苏氨酸；5—丝氨酸；6—亮氨酸；7—异亮氨酸；8—脯氨酸；9—半胱氨酸；10—羟脯氨酸；11—天冬氨酸；12—蛋氨酸；13—谷氨酸；14—苯丙氨酸；15—赖氨酸；16—酪氨酸；17—精氨酸；18—色氨酸

色谱柱：OV-1，25m×0.25mm，d_f=0.25μm　　检测器：FID

柱　温：110℃(6min)→270℃，3℃·min^{-1}　　气化室温度：250℃

载　气：H_2，110kPa　　检测器温度：250℃



色谱峰：1—赤藓醇；2—阿糖醇；3—甘露醇；4—山梨糖醇；5—肌醇；6—鳄梨糖醇(内标物)

色谱柱：5% QF-1，Chromosorb W HP (80目～100目)，3m×3mm

柱　温：220℃

载　气：N_2，20ml·min^{-1}

检测器：FID

图 30-57　酒醋中多元醇(乙酰衍生物)[46]

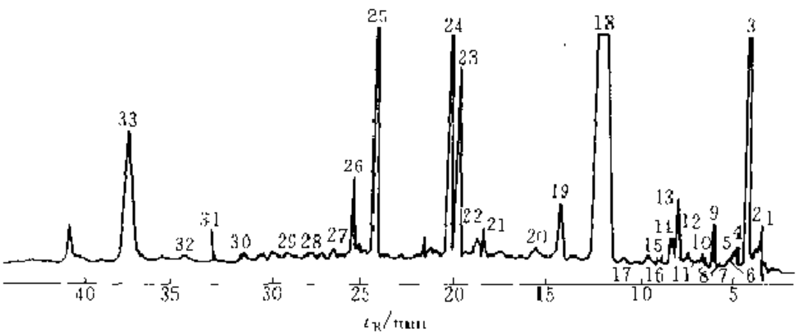


图 30-58　白兰地酒二硫化碳萃取液[47]

色谱峰：1—乙酸乙酯；2—1,1-二乙氧基乙烷；3—甲醇；4—丙酸乙酯；5—异丁酸乙酯；6—乙酸丙酯；7—1-丙醇；8—乙酸异丁酯；9—丁酸乙酯；10—甲苯；11—乙酸正丁酯+2-甲基-1-丙醇+2-乙基丁醛；12—2-甲基-2-丁醇+甲基丁基酮；13—乙酸异戊酯+丁醇；14—甲酸戊酯；15—乙基苯；16—间二甲苯+对二甲苯；17—邻二甲苯；18—乙酸戊酯+2-甲基-1-丁醇+3-甲基-1-丁醇；19—己酸乙酯+1-戊醇；20—甲酸三乙基酯；21—2-乙基-1-丁醇；22—2-甲基-1-戊醇；23—庚酸乙酯；24—1-己醇；25—辛酸乙酯；26—苯乙醚+糠醛；27—癸酸异戊酯；28—壬酸甲酯+2-甲基丁硫醇；29—1-辛醇；30—壬酸乙酯；31—1-壬醇；32—癸酸甲酯；33—癸酸乙酯

色谱柱：Carbowax 20M，50m×0.33mm

柱　温：82℃(17min)→130℃，21℃·min^{-1}

载　气：H_2，3cm·s^{-1}

检测器：FID

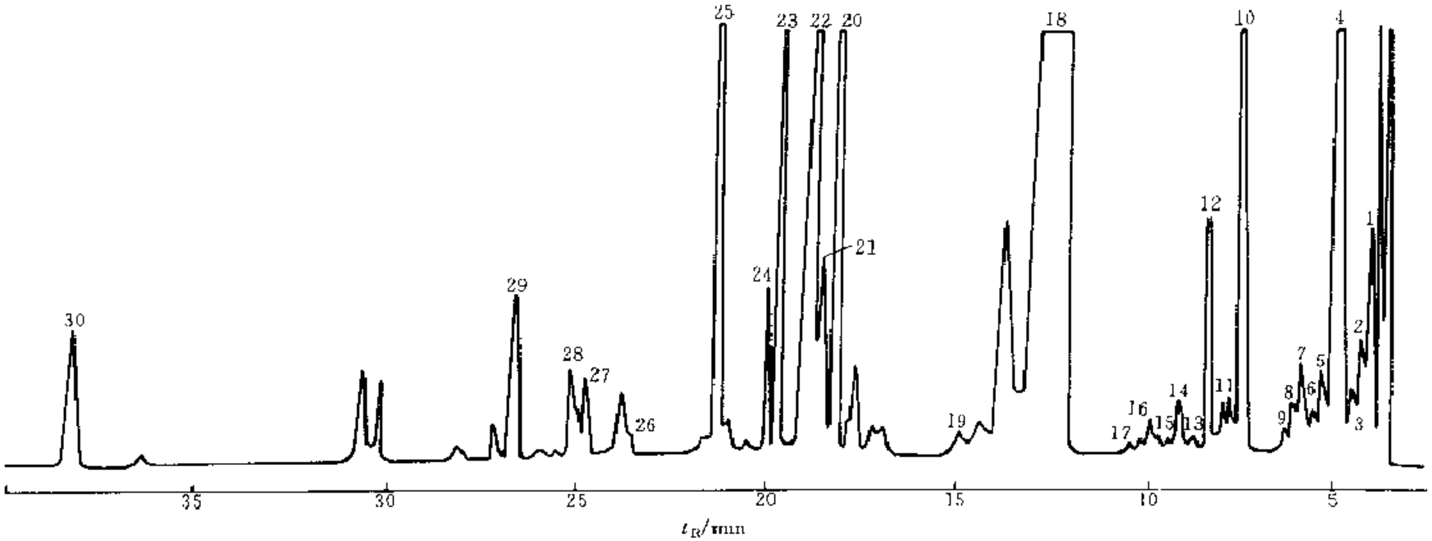


图 30-59　白兰地酒乙醚萃取液[47]

色谱峰：1—甲酸乙酯+2-甲基丙醇+丙醛+2-甲基丙醛；2—乙酸甲酯；3—2-丙醇+甲乙酮+1-丁醛；4—乙醇+3-甲基丁醛；5—丙酸乙酯；6—乙酸丙酯+1-戊醛+2-丁醇；7—1-丙醇；8—乙酸异丁酯；9—乙酸正丁酯+2-乙基丁醛+2-甲基-1-丙醇；10—2-甲基-2-丁醇+甲丁酮；11—乙酸异戊酯；12—2-戊醇+苄基甲基醚；13—甲酸戊酯；14—1-丁醇；15—苯甲醇+乙基苯；16—间二甲苯+对二甲苯；17—邻二甲苯；18—乙酸戊酯+3-甲基-1-丁醇；19—1-戊醇；20—2-乙基-2-丁醇；21—乙基碳酸酯；22—2-甲基-1-戊醇；23—庚酸乙酯；24—1-己醇；25—1-乙氧基-1-丙氧基乙烷；26—辛酸乙酯；27—苯乙醚+糠醛；28—己酸异丙酯；29—苯酸甲酯+乙酸乙基氢硫基酯+工酸甲酯；30—癸酸乙酯

色谱柱：Carbowax 20M，50m×0.33mm

柱　温：82℃(17min)→130℃，24℃·min^{-1}

载　气：H_2，30cm·s^{-1}

检测器：FID

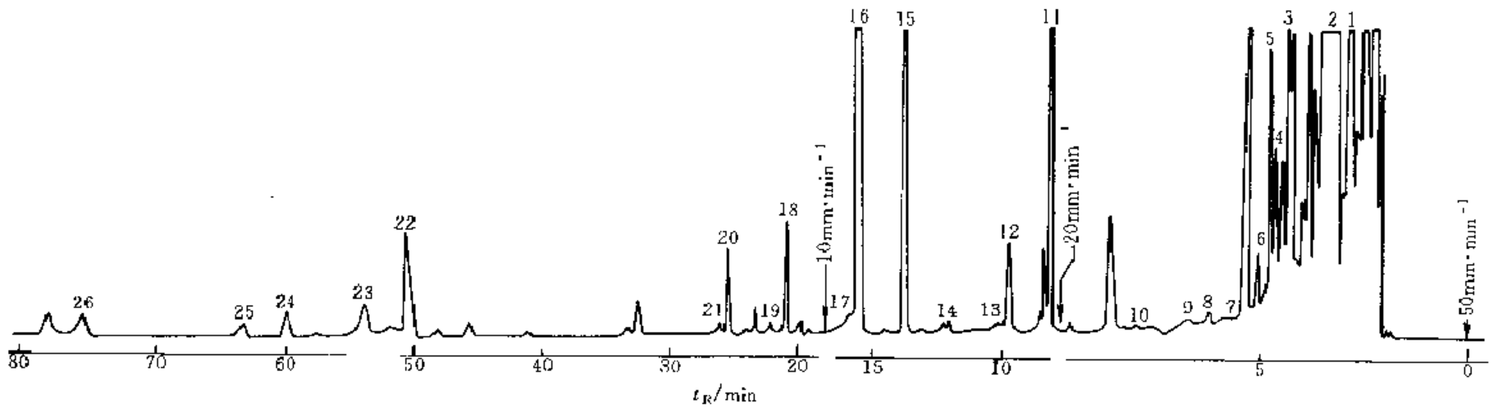


图 30-60　白兰地酒中有机酸(甲酯衍生物)[47]

色谱峰：1—乙酸；2—乙醇+丙酸+乙酸乙酯+2-甲基丙酸+苯；3—正丁酸；4—2-甲基丁酸；5—3-甲基丁酸；6—丁酸乙酯+甲苯；7—正戊酸；8—乙基苯；9—间二甲苯+对二甲苯；10—邻二甲苯；11—正己酸；12—己酸乙酯；13—5-甲基己酸；14—正庚酸；15—乳酸；16—乳酸乙酯+苯乙醇；17—2-乙氧基乙醇；18—正辛酸；19—1,3-二乙氧基-2-丙醇；20—正壬酸；21—辛酸乙酯；22—4-氧代戊酸；23—糠酸；24—丁二酸二甲基酯；25—正癸酸；26—苯甲酸

色谱柱：Carbowax 20M，56m×0.32mm

柱　温：84℃

载　气：H_2，30cm·s^{-1}

检测器：FID

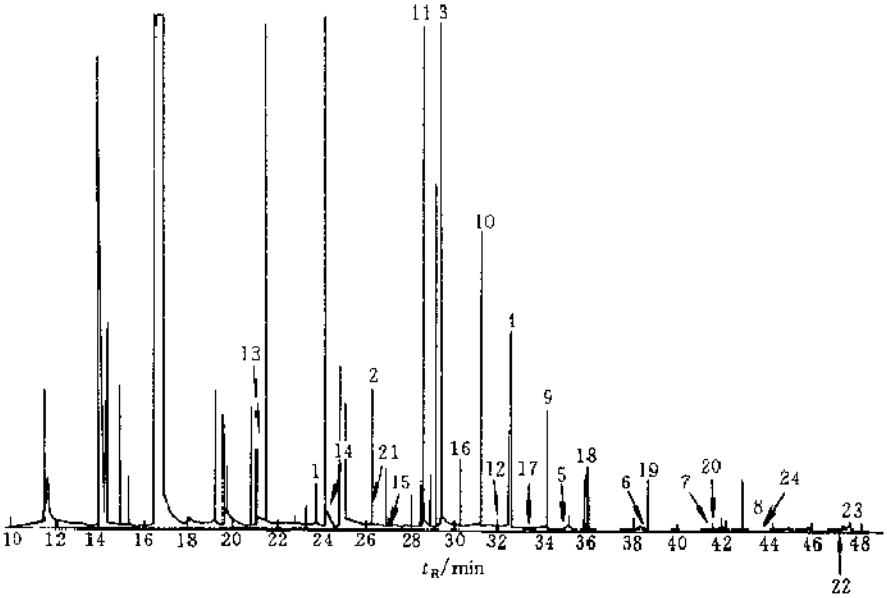


图 30-61 法国白兰地酒(五氟苯胺衍生物)[48]

色谱峰：1—丁醛；2—戊醛；3—己醛；4—庚醛；5—辛醛；6—壬醛；7—癸醛；8—十一醛；9—苯甲醛；10—β-环柠檬醛；11—糠醛；12—5-甲基糠醛；13—2-丁酮；14—2-戊酮；15—2-己酮；16—2-庚酮；17—2-辛酮；18—2-壬酮；19—2-癸酮；20—2-十一酮；21—3-己酮；22—反-1-(2,3,6-三甲基苯基)-2-丁烯-1-酮；23—反-4-(2,3,6-三甲基苯基)-3-丁烯-2-酮；24—2,3-丁二酮

色谱柱：CP Sil 5 CB，50m×0.2mm，d_f = 0.12μm

柱　温：35℃(0.7min)→50℃(3.4min)，20℃·min^{-1}→250℃，4℃·min^{-1}

检测器：MS(离子选择检测为 M/Z = 181，35eV)

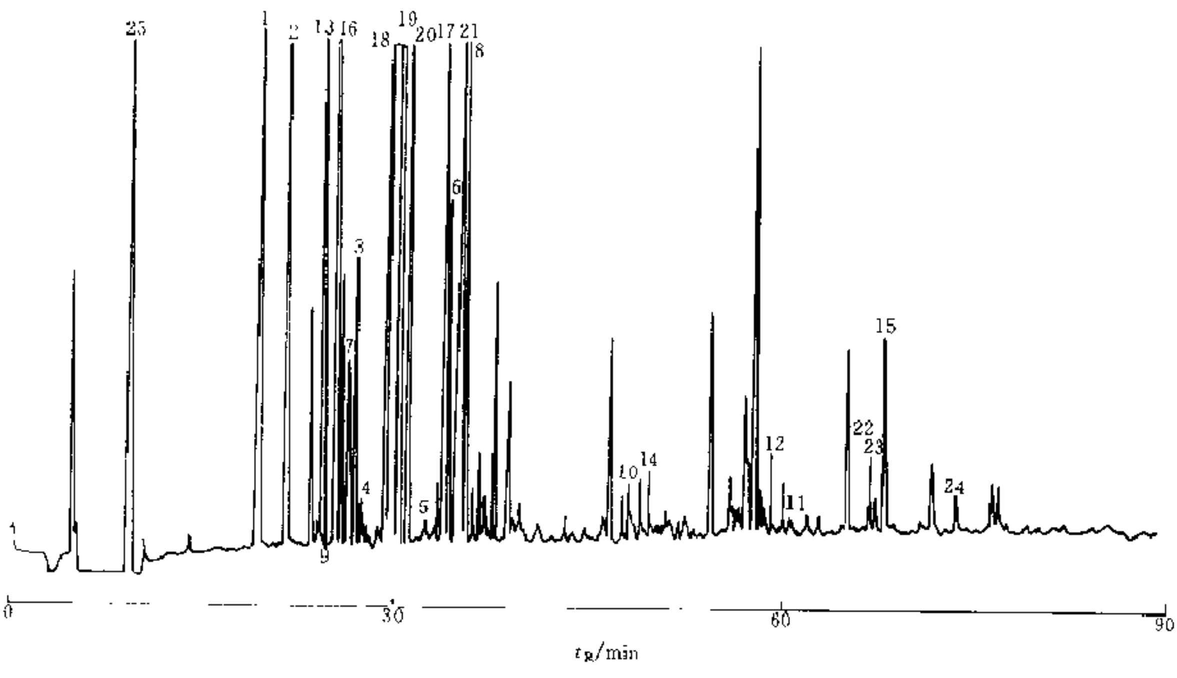


图 30-62 威士忌酒中杂环氮化物[49]

色谱峰：1—吡啶；2—2-甲基吡啶；3—3-甲基吡啶；4—4-甲基吡啶；5—2,4,6-三甲基吡啶；6—4-乙基吡啶；7—3-乙基吡啶；8—5-乙基-2-甲基吡啶(内标物)；9—2-异丙基吡啶；10—2-乙酰基吡啶；11—3-乙酰基吡啶；12—4-乙酰基吡啶；13—噻唑；14—2-乙酰基噻唑；15—苯并噻唑；16—2-甲基吡嗪；17—2,3-二甲基吡嗪；18—2,5-二甲基吡嗪；19—2,6-二甲基吡嗪；20—2-乙基吡嗪；21—2,3,5-三甲基吡嗪；22—喹啉；23—2-甲基喹啉；24—6-甲基喹啉；25—吡咯烷

色谱柱：Supercowax 10，30m×0.25mm　　载　气：He，1ml·min^{-1}

柱　温：50℃(8min)→250℃(30min)，2℃·min^{-1}　　检测器：FID

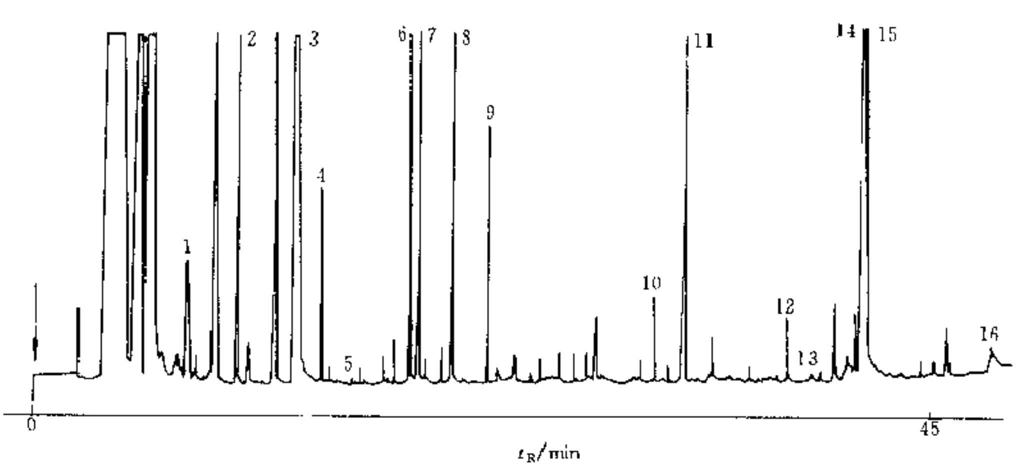


图 30-63　红酒[illegible]

色谱峰：1—丁酸乙酯；2—乙酸异戊酯；3—异戊醇；4—己酸乙酯；5—乙酸己酯；6—乙酸乙酯；7—己醇；8—3-辛醇(内标物)；9—辛酸乙酯；10—癸酸乙酯；11—丁二酸二乙酯；12—乙酸苯乙基酯；13—十二酸乙酯；14—2-苯基乙醇；15—2，6-二叔丁基对甲酚；16—辛酸

色谱柱：CP Wax 52 CB，50m×0.25mm，d_f=0.2μm

柱　温：45℃(1min)→240℃，3℃·min^{-1}

载　气：H_2，56kPa

检测器：FID

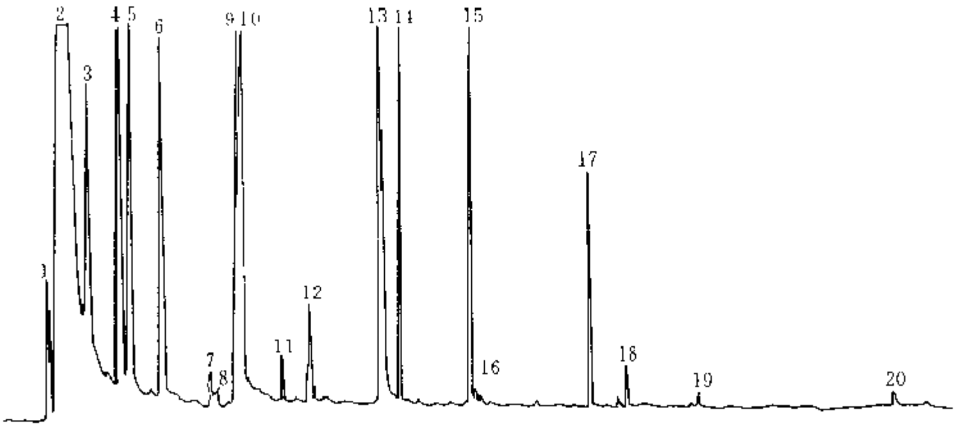


图 30-64　青岛啤酒[illegible]

色谱峰：1—乙醛；2—乙醇；3—正丙醇；4—乙酸乙酯；5—异丁醇；6—正丁醇(内标物)；7—丙酸乙酯；8—乙酸丙酯；9—异戊醇；10—活性戊醇；11—乙酸异丁酯；12—丁酸乙酯；13—乙酸异戊酯；14—乙酸-2-甲基丁酯—戊酸乙酯(内标物)；15—己酸乙酯；16—乙酸己酯；17—辛酸乙酯；18—乙酸苯乙酯；19—癸酸乙酯；20—十二酸乙酯

色谱柱：SE 54，25m×0.31mm，d_f=1.05μm

柱　温：10℃(5min)→100℃，5℃·min^{-1}→180℃(10min)，10℃·min^{-1}

载　气：N_2，17.6cm·s^{-1}

检测器：FID

进样方式：动态顶空进样

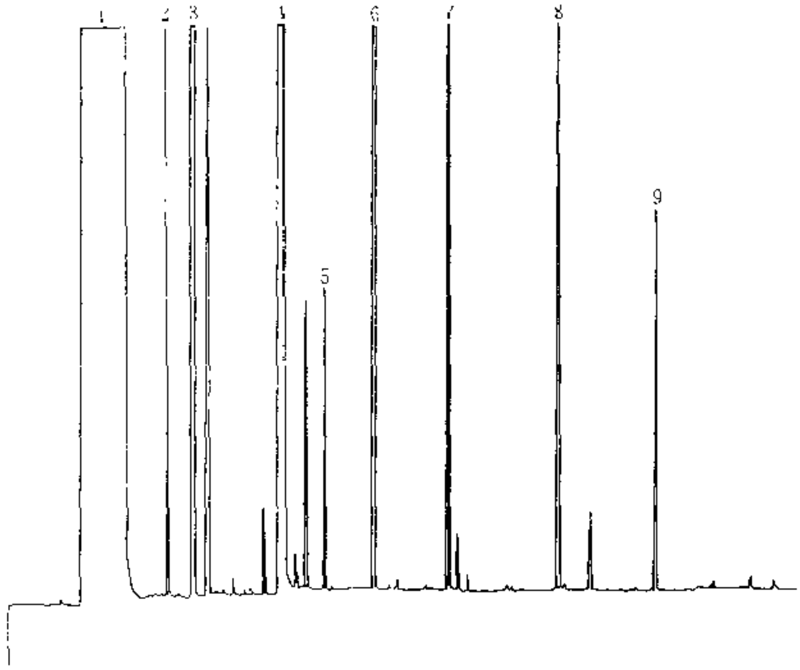


图 30-65　啤酒(一)[32]

色谱峰：1—乙醇；2—正丙醇；3—乙酸乙酯；4—异戊醇＋未知物；5—丁酸乙酯；6—乙酸异戊酯＋未知物；7—己酸乙酯；8—辛酸乙酯；9—癸酸乙酯

色谱柱：SE-54，25m×0.31mm
柱　温：−20℃(2min)→180℃，6℃·min⁻¹
载　气：He，25 cm·s⁻¹
检测器：FID
气化室温度：150℃
检测器温度：300℃
进样方式：顶空法

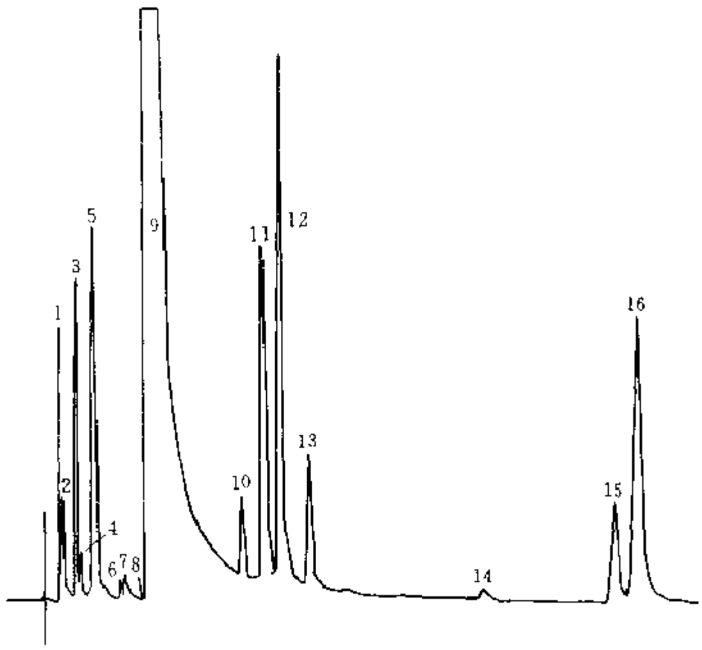
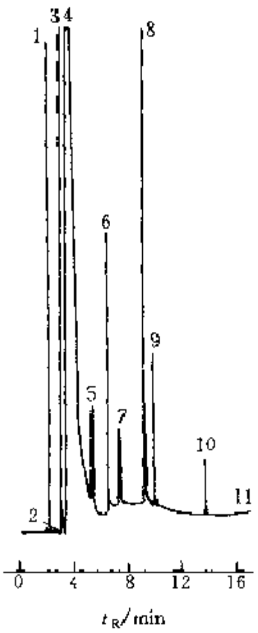


图 30-66　啤酒(二)[53]

色谱峰：1—乙醛；2—二甲硫；3—甲酸乙酯；4—丙酮；5—乙酸乙酯；6—丙酸乙酯；7—甲醇；8—2-丙醇-2；9—乙醇；10—正丙醇；11—乙酸异戊酯；12—4-庚酮(内标)；13—2-甲基丙醇；14—辛酸乙酯；15—旋光戊醇；16—异戊醇

色谱柱：Carbowax 400，100m×0.5mm
柱　温：65.5℃
载　气：N_2
检测器：FID
气化室温度：150℃
检测器温度：150℃
进样方式：顶空进样



色谱峰：1—乙醛；2—丙酮；3—醋酸乙酯；4—乙醇；5—正丙醇；6—异丁醇；7—醋酸异戊酯；8—异戊醇；9—正己酸乙酯（2.597×10^{-6}）；10—正辛酸乙酯（0.813×10^{-6}）；11—正癸酸乙酯

色谱柱：CBP 20，25m×0.33mm，d_f=0.5μm

柱　温：30℃(5min)→200℃，10℃·min^{-1}

载　气：He，1.35ml·min^{-1}

检测器：FID

检测器温度：230℃

图 30-67　日本米酒[34]

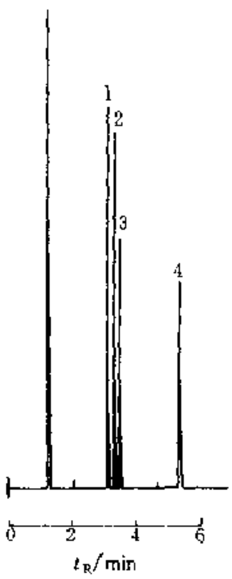


图 30-68　食品抗氧化剂[54]

色谱峰：1—BHA；2—BHT；3—叔丁基氢醌；4—4-羟基甲基-2,6-二叔丁基酚酮

色谱柱：BP5，25m×0.32mm，d_f=0.5μm

柱　温：180℃→230℃，8℃·min^{-1}

检测器：FID

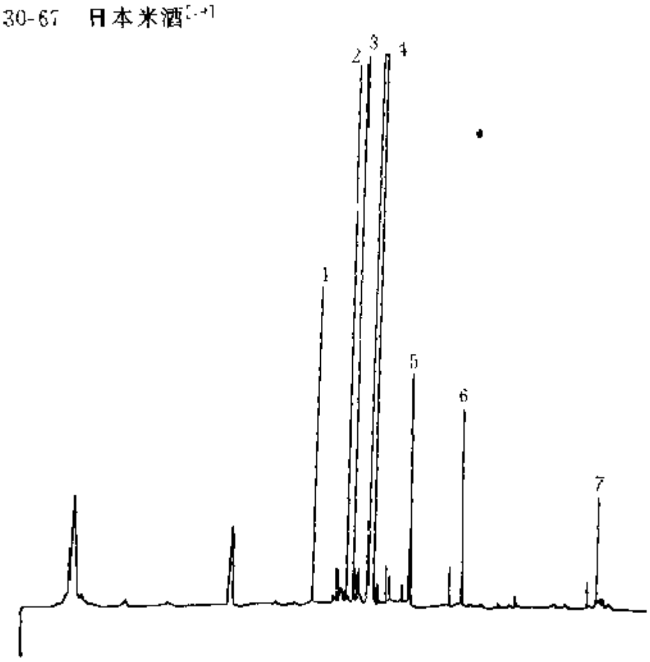


图 30-69　橘汁[12]

色谱峰：1—α-蒎烯；2—月桂烯；3—正辛醛；4—1,8萜二烯；5—沉香醇；6—正癸醇；7—米栾倍半萜

色谱柱：SE-54，25m×0.31mm

柱　温：10℃(2min)→180℃，6℃·min^{-1}

载　气：He，25 cm·s^{-1}

检测器：FID

气化室温度：150℃

检测器温度：300℃

进样方式：顶空法

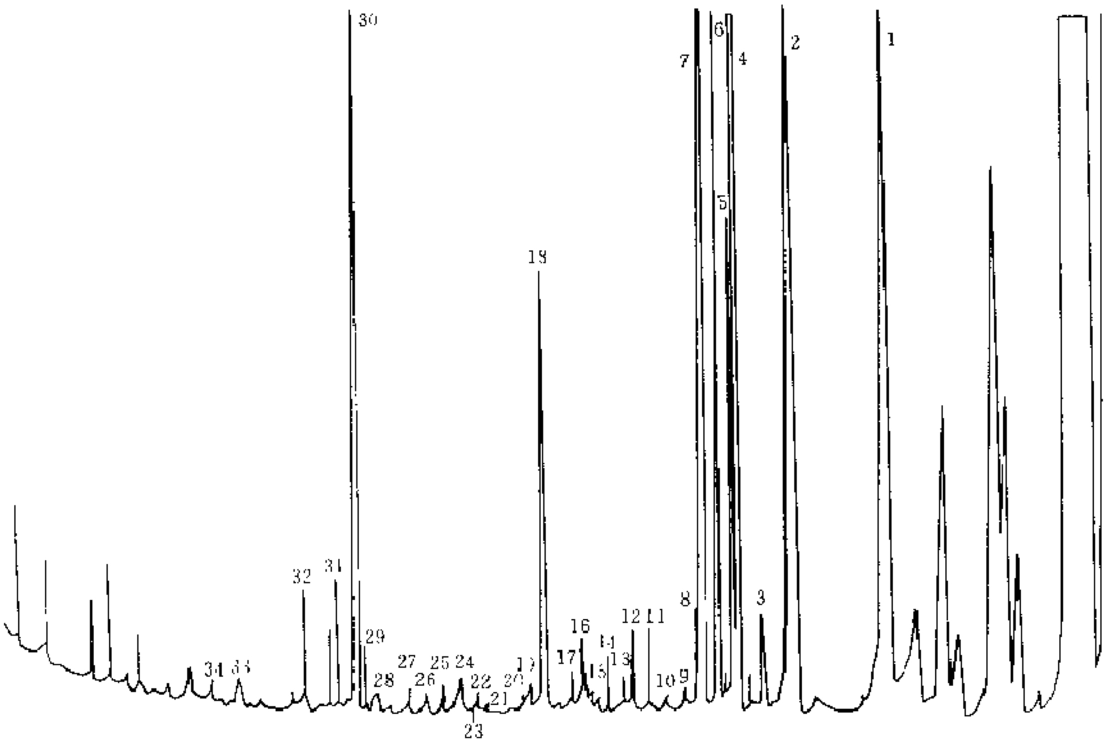


图 30-70 葡萄汁中挥发性组分[5]

色谱峰：1—3-甲基丁醇；2—3-羟基-2-丁酮；3—1-戊烯-3-醇；4—甲酸己酯；5—4-甲基戊醇；6—甲酸-反-3-己烯酯；7—反-2-己烯-1-醇；8—环己醇；9—7-辛烯-4-醇；10—1-辛烯-3-醇；11—1,4-二氯苯；12—2-乙基己醇；13—苯乙醛；14—S-2,3-丁二醇；15—二甲基亚砜；16—甲哪醇；17—6-甲基庚醇；18—R-2,3-丁二醇；19—5-甲基-2-异丙基环己醇；20—壬醇；21—3-甲硫基丙醇；22—甘菊环；23—1,3-二甲氧基苯；24—醋酸-2-苯乙酯；25—牻牛儿醇；26—苯甲醇；27—二甲基磺酰；28—苯乙醇；29—苯并噻唑；30—3-羟基-二氢呋喃-2-酮；31—呋喃-3-乙酸-1-己基(2,5-二甲氧基)酯；32—2,5-二丁基[5,10]己烷-2-酮；33—4-乙基苯酚；34—1-甲基-3-乙基-1-氢茂-2,5-二酮

色谱柱：Superox-4 空心柱

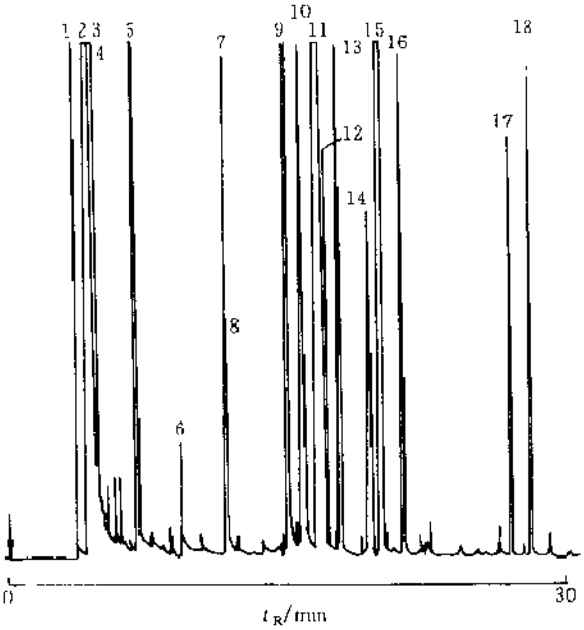
柱　温：25°C(10min)→250°C，3°C·min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FID

气化室温度：150°C

检测器温度：250°C



色谱峰：1—乙醛；2—乙醇；3—戊烷；4—二甲硫；5—乙酸乙酯；6—正丁醇；7—丙酸乙酯；8—乙酸丙酯；9—甲苯；10—2-甲基丁酸甲酯；11—己醛；12—丁酸乙酯；13—乙酸丁酯；14—反-2-己醛；15—异戊酸乙酯；16—乙酸异戊酯；17—乙酸-2-己酯；18—苎烯

色谱柱：CP Sil 5 CB，50m×0.25mm，d_f=0.4μm

柱　温：40°C(10min)→210°C，5°C·min^{-1}

载　气：He

检测器：FID

进样方式：顶空法

图 30-71 苹果汁[58]

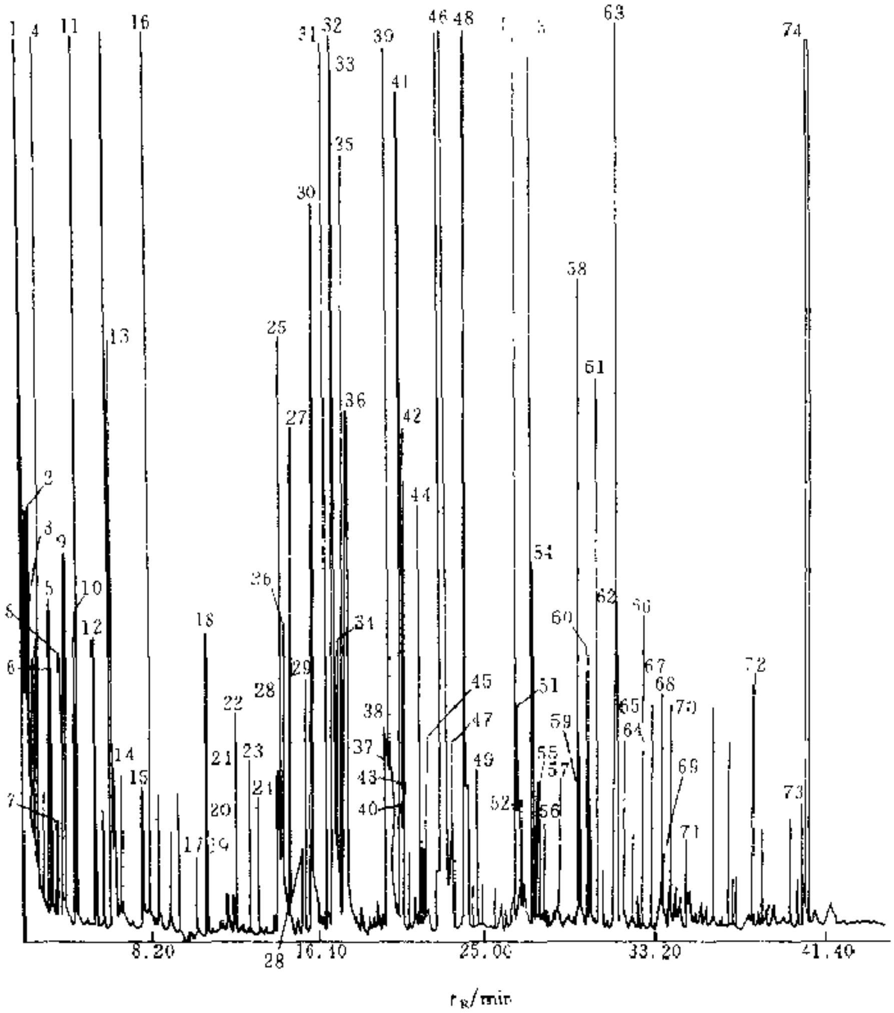


图 30-72 炒青绿茶香气浓缩物[18]

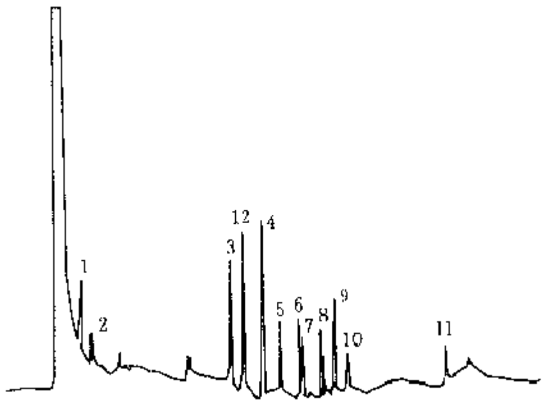
色谱峰：1—乙酸乙酯；2—2-戊酮；3—2-甲基丁醇；4—1-戊烯-3-醇；5—1,1-二氧乙基乙烷；6—3-甲基-2,3-二氢呋喃；7—吡啶；8—反-2-戊烯醛；9—反-2-戊烯-1-醇；10—己醇；11—反-2-己烯醇；12—糠醛；13—顺-3-己烯醇甲酸酯；14—1,2-二乙基环丁烷；15—1-戊烯-3-酮；16—庚醛；17—丙酸；18—苯甲醛；19—1-辛烯-3-醇；20—2-甲基吡嗪；21—2,5-二甲基吡嗪；22—异戊基呋喃；23—辛醇；24—2,4-庚二烯醛；25—苯甲醇；26—苯乙醛；27—γ-萜品烯；28—反-2-辛烯醛；29—苯乙酮；30—芳香醇氧化物Ⅰ(呋喃型,顺)；31—芳樟醇氧化物Ⅱ(呋喃型,反)；32—芳樟醇；33—1,5-辛二烯-3-醇；34—4-羟基-4-甲基环己酮；35—苯乙醇；36—醋酸橙花酯；37—反-2-壬烯醛；38—芳樟醇氧化物Ⅲ(吡喃型,顺)；39—芳樟醇氧化物Ⅳ(吡喃型,反)；40—萘；41—α-萜品醇；42—水杨酸甲酯；43—苯乙醇甲酸酯；44—5-羟基癸酸乙酯；45—α-香叶醛；46—香叶醇；47—橙花醇；48—吲哚；49—茶螺烷；50—顺-3-己烯醇己酸酯；51—反-3-己烯醇己酸酯；52—δ-癸内酯；53—顺-茉莉酮；54—α-玷吧烯；55—α-雪松烯；56—β-丁香烯；57—β-倍半水芹烯；58—β-紫罗兰酮；59—反-2-己烯基丁酸酯；60—α-葎草烯；61—2,6-二(1,1-二甲基乙基)-4-甲基苯酚；62—δ-杜松烯；63—橙花叔醇；64—顺-3-己烯基苯甲酸酯；65—顺-3-己烯醇-顺-3-己烯酯；66—α-雪松醇；67—α-毕澄茄烯；68—α-毕澄茄醇；69—榧叶醇；70—杜松醇T；71—蒽；72—6,10,14-三甲基-2-十五烷酮；73—十六酸甲酯；74—邻苯二甲酸二丁酯

色谱柱：DB-5，30m×0.2mm

柱　温：10℃(3min)→60℃，2℃·min^{-1}→250℃(10min)，5℃·min^{-1}

检测器：MS

气化室温度：200℃



色谱峰：1—丙氨酸；2—甘氨酸；3—丝氨酸；4—脯氨酸；5—天冬氨酸；6—赖氨酸；7—酪氨酸；8—天冬素；9—精氨酸；10—组氨酸；11—半光氨酸；12—亮氨酸（内标物）

色谱柱：OV 101，30m×0.29mm

柱　温：90℃→100℃（3min），10℃·min⁻¹→250℃（16min），10℃·min⁻¹

载　气：N_2，26.8cm·s⁻¹

检测器：FID

气化室温度：230℃

检测器温度：250℃

图 30-73　发酵无醇饮料中氨基酸(三氟乙酰正丁酯衍生物)[57]

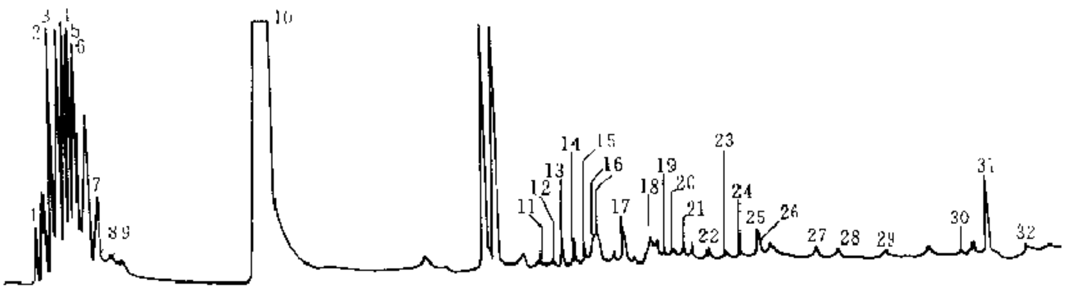
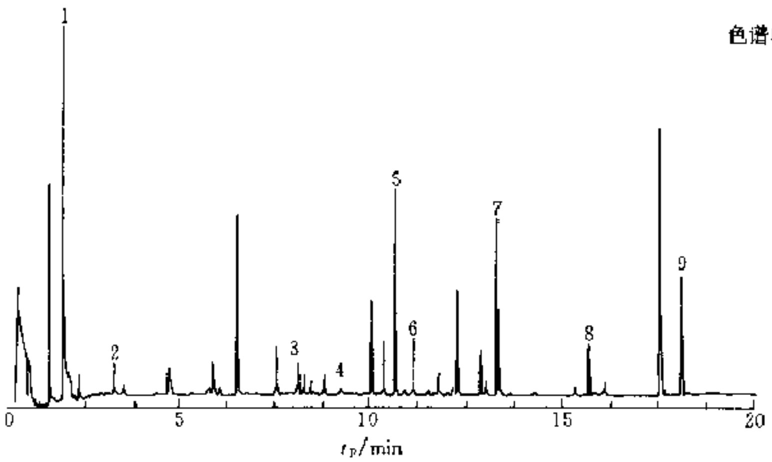


图 30-74　四川秋乌龙茶[59]

色谱峰：1—乙醛；2—乙醚(溶剂)；3—2-甲基丙醛；4—异丙醇；5—2-丁酮；6—乙酸乙酯；7—正丁醇；8—噻吩；9—正戊醛；10—2-戊醇；11—苯乙酮；12—1-辛醇；13、18—反芳樟醇氧化物(呋喃型)；14—顺芳樟醇氧化物(呋喃型)；15—芳樟醇；16—β-苯乙醇；17—苯乙醛；19—1-壬醇；20—水杨酸甲酯；21—辛酸乙酯；22—甲酸香叶酯；23—橙花醛；24—香叶醛；25—吲哚；26—香荆芥酚；27—乙酸橙花酯；28—乙酸香叶酯；29—β-紫罗兰酮；30—δ-杜松烯；31—橙花叔醇；32—茉莉酮酸甲酯

色谱柱：SE-30 SCOT 柱，36m×0.32mm　　载　气：N_2，20cm·s⁻¹

柱　温：60℃(2min)→210℃，4℃·min⁻¹　　检测器：FID



色谱峰：1—2,5-二氢呋喃或 2-甲基-2-丙烯醛；2—2,4 己二烯醛；3—2-甲基-6-亚甲基-3,7-辛二烯-2-醇；4—2,4 辛二烯醛；5—2,6-二亚甲基-7-辛烯-3-酮；6—2-亚甲基-6-甲基-5,7-辛二烯-3-醇；7—2,4-十一碳二烯醛；8—喇叭烯；9—喇叭醇

图 30-75　喇叭茶叶挥发油[6]

色谱柱：DB 624，30m×0.32mm，d_f=1.8μm　　载　气：He

柱　温：60℃→280℃，10℃·min⁻¹　　检测器：MS

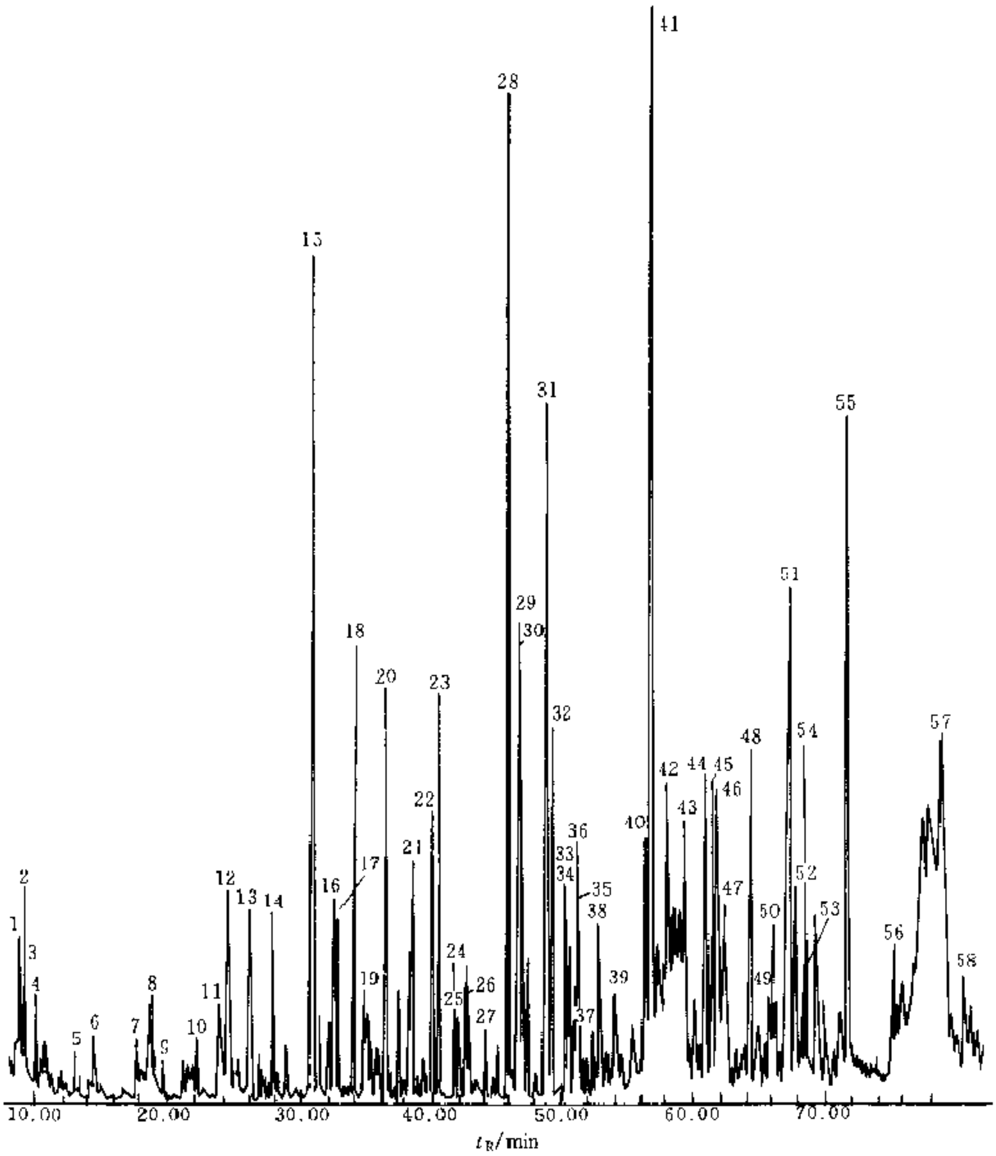


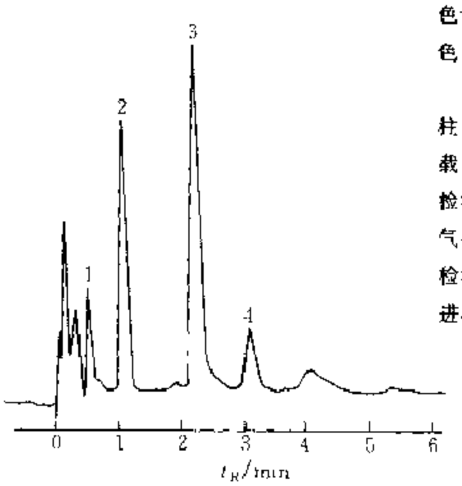
图 30-76 铁观音茶香气浓缩物[30]

色谱峰：1—己醛；2—2,4,6 三甲基癸烷；3—2-乙基-1-丁醇-1；4 乙苯；5—2-己烯醛；6—1-戊醇；7—2 己烯醇；8—6 甲基-5-庚烯-2-酮；9—辛酮-4；10—壬醛；11—乙酸；12—氧化沉香醇；13—反氧化沉香醇；14—苯甲醛；15—沉香醇；16—2,6-二甲基环己醇；17—2-甲基-4-氨基苯酚；18—3-己烯醇己酸酯；19—甲基甲氧基苯；20 3-甲基丁酸；21—α 萜品醇；22—戊酸；23—环氧沉香醇；24—水杨酸甲酯；25—甲基吡嗪；26—α-法呢烯；27—2,7 二甲基-2,6-辛二烯醇；28—己酸；29—反牻牛儿醇；30—苯甲醇；31—苯乙醇；32—苯乙腈；33—苯并噻唑；34 顺-茉莉酮；35—庚酸；36—4-甲基-3-乙基吡咯；37—苯乙醇-2-甲基丁酸酯；38—β-紫罗酮；39—二羟基-5-丙基-2-呋喃酮；40—辛酸；41—橙花叔醇；42—2-甲基苯甲醇乙酸酯；43—2(2′-甲基-1′-烯丙基)环丁酮；44 6-甲基 3 (1 甲乙基)2-环己烯酮；45—壬酸；46—6,10,14-三甲基-2-十五烷酮；47—1,2 苯二甲酸二丁酯；48 己酸癸酯；49—14-甲基十五烷酸甲酯；50 癸酸；51 顺法呢醇；52 十六烷酸乙酯；53—茉莉甲酯；54—1,5-二溴 1 戊烯；55—吲哚；56—咖啡因；57—十六烷酸；58—花生三烯酸甲酯

色谱柱：HP-20M，50m×0.2mm，d_f=0.2μm　　检测器：MS

柱　温：50°C(5min)→190°C(10min)，2°C·min^{-1}　　气化室温度：200°C

载　气：He，0.5 ml·min^{-1}



色谱峰：1—乙醛；2—丙酮；3—乙醇；4—丁二酮

色谱柱：15% Carbowax 20M，Chromosorb W AW-DMCS(60目～100目)，1.83m×3mm

柱　温：70℃

载　气：He，20ml·min^{-1}

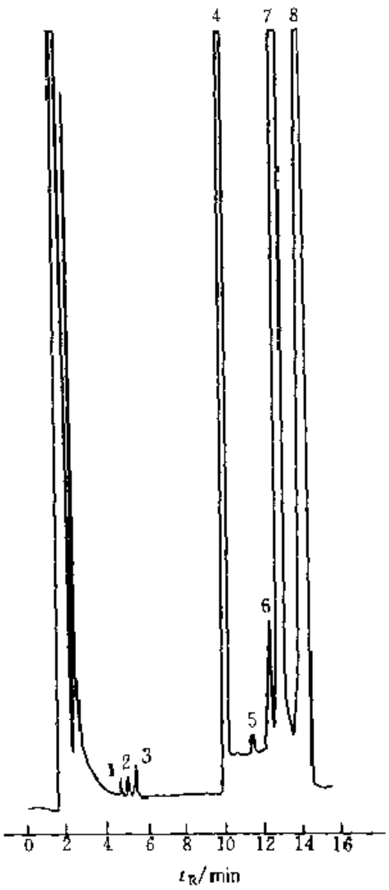
检测器：FID

气化室温度：140℃

检测器温度：140℃

进样方式：顶空法（针150℃；样品75℃）

图30-77　牛奶



色谱峰：1,2,3—半乳糖；4—苯基-β-葡萄甙(内标物)；5—α-表乳糖；6—β-表乳糖；7—α-乳糖；8—β-乳糖

色谱柱：2% OV 17，Volaspher A-2(120目～140目)，3m×1.0mm

柱　温：200℃(2min)→270℃，15℃·min^{-1}

载　气：N_2，10ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：300℃

检测器温度：300℃

图30-78　牛奶中碳水化合物(TMS衍生物)[62]

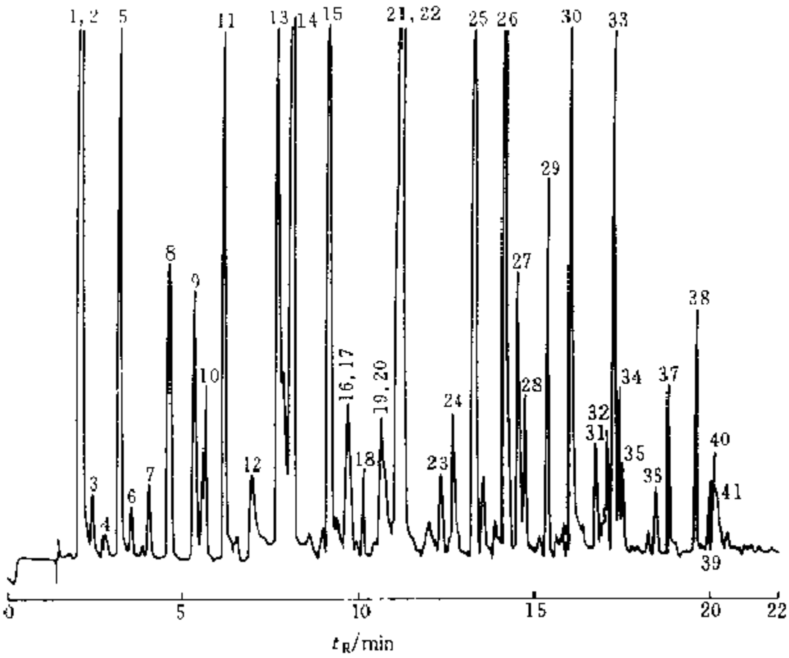


图 30-79　咖啡[63]

色谱峰：1—乙醛；2—甲醇；3—甲酸甲酯；4—乙醇；5—2-丙酮；6—呋喃；7—醋酸甲酯；8—2-甲基丙醛；9—2,3-丁二酮；10—2-丁酮；11—2-甲基呋喃；12—醋酸；13—3-甲基丁醛；14—2-甲基丁醛；15—2,3-戊二酮；16、17—未知物；18—2,5-二甲基呋喃；19—吡嗪；20,24—未知物；21—1-甲基-1*H*-吡咯；22—吡啶；23—2,3-己二酮；25—2-甲基-二氢-3(2*H*)-呋喃酮；26—甲基吡嗪；27—2-呋喃羧醛；28—二乙酸-1,2-乙二醇酯；29—2-呋喃甲醇；30—未知物；31—甲酸糠基酯；32—1-(2-呋喃基)-乙酮；33—2,6-二甲基吡嗪；34—乙基吡嗪；35—2,3-二甲基吡嗪；36—2-甲基-3-戊酮；37—5-甲基-2-呋喃羧醛；38—醋酸-2-呋喃甲醇酯；39—2-乙基-5-甲基吡嗪；40—2-乙基-6-甲基吡嗪；41—2-乙基-3-甲基吡嗪

色谱柱：JXR，25m×0.32mm，d_f=0.35μm

柱　温：40℃(2min)→60℃(1min)，5℃·min^{-1}→140℃，7℃·min^{-1}→230℃，10℃·min^{-1}

载　气：H_2，3.6×10^{4}Pa

进样方式：顶空法

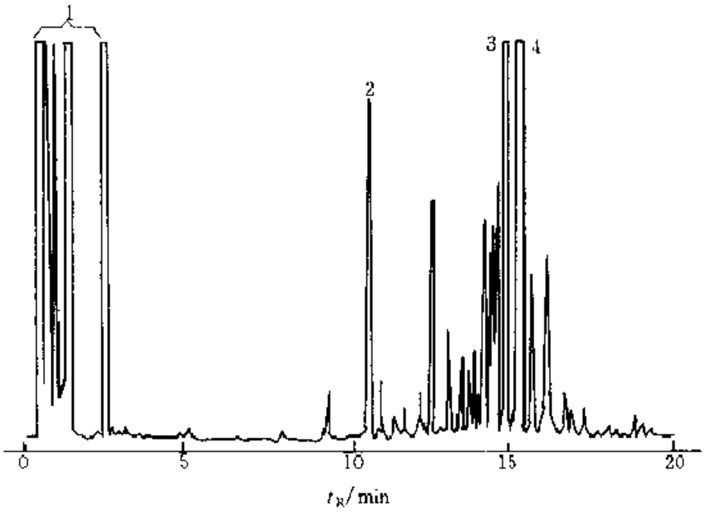


图 30-80　蜂王浆中脂肪酸(TMS 衍生物)[64]

色谱峰：1—溶剂组分；2—癸酸；3—10-羟基癸酸；4—10-羟基癸烯-2 酸

色谱柱：SE-30，12m×0.22mm

柱　温：50℃(1min)→280℃(5min)，10℃·min^{-1}

载　气：N_2，18cm·s^{-1}

检测器：FID

气化室温度：240℃

检测器温度：300℃

第三节　食品污染物色谱图

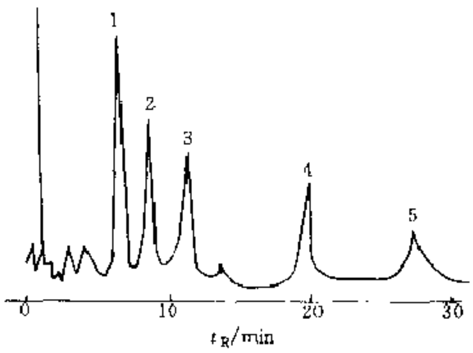


图 30-81　肉中亚硝胺(硝胺衍生物)[65]

色谱峰：1—二甲基亚硝胺；2—二乙基亚硝胺；3—二异丁基亚硝胺；4—二正丁基亚硝胺；5—N-亚硝基吡咯烷

色谱柱：10% Carbowax 20M，Celite AW-HMDS，1.52m

柱　温：150℃

载　气：Ar，36 ml·min⁻¹

检测器：ECD

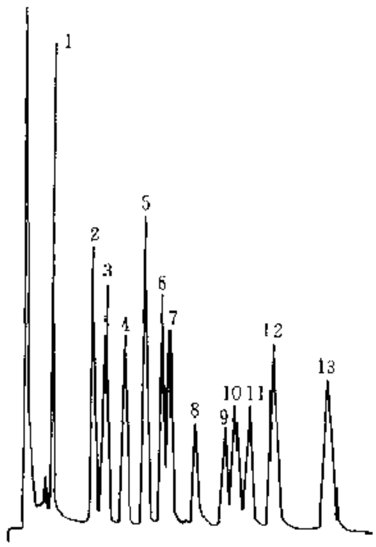


图 30-83　黄瓜中农药[66]

色谱峰：1—敌敌畏；2—3911；3—二嗪农；4—乙嘧硫磷；5—巴胺磷；6—甲嘧硫磷；7—异稻瘟净；8—乐果；9—喹硫磷；10—甲基对硫磷；11—杀螟松；12—对硫磷；13—乙硫磷

色谱柱：1.5% QF-1，Chromosorb W AW-DMCS(60 目～80 目) 2.6m×3.2mm

柱　温：190℃(8min)→215℃(13min)，30℃·min⁻¹

载　气：N_2，22ml·min⁻¹

检测器：FPD

气化室温度：265℃

检测器温度：265℃

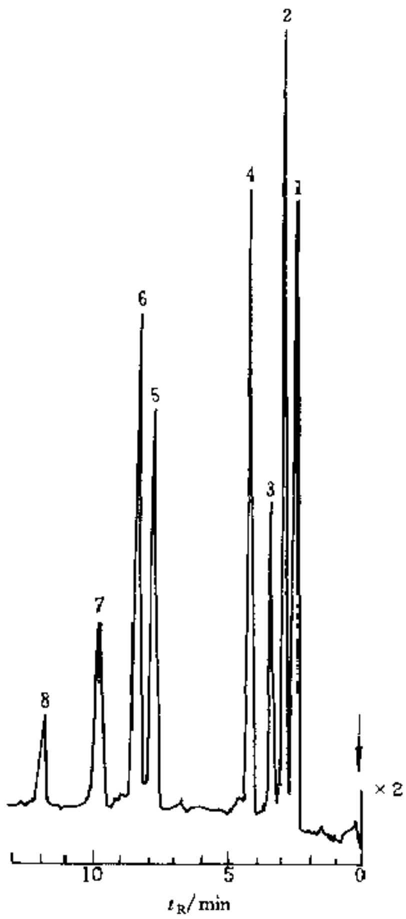


图 30-82　肉中亚硝胺[66]

色谱峰：1—N-亚硝基二甲基胺；2—N-亚硝基二乙基胺；3—N-亚硝基二异丙基胺(内标物)；4—N-亚硝基二丙基胺；5—N-亚硝基二丁基胺；6—N-亚硝基哌啶；7—N-亚硝基吡咯烷；8—N-亚硝基吗啉

色谱柱：CP-Wax 57 CB，10m×0.32mm，d_f=1.27μm

柱　温：50℃(0.5min)→105℃，25℃·min⁻¹

载　气：He，50kPa

检测器：热能分析器

气化室温度：200℃

检测器温度：500℃

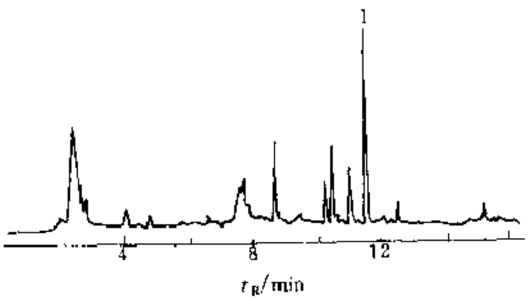


图 30-84　禽肉中克球酚(乙酰衍生物)[67]

色谱峰：1 -克球酚

色谱柱：HP-5，25m×0.32mm，d_f=0.25μm

柱　温：50℃（2min）—→180℃（1min），30℃・min⁻→260℃（5min），4℃・min^{-1}

载　气：N_2，25cm・s^{-1}

检测器：ECD

气化室温度：270℃

检测器温度：300℃

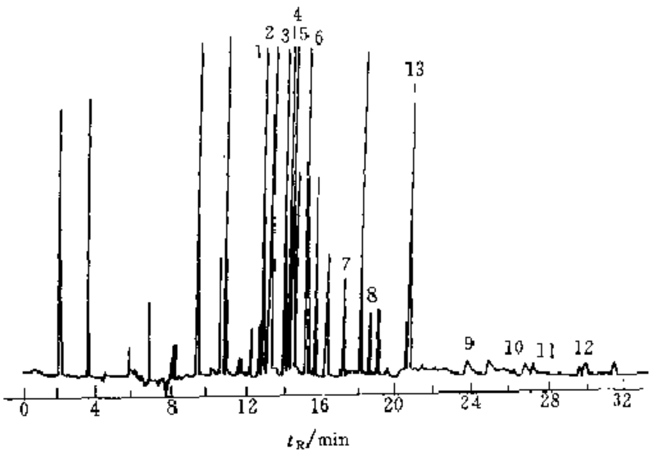


图 30-85　人参中有机氯农药[76]

色谱峰：1—α-六六六；2—六氯苯；3—β-六六六；4—γ-六六六；5—五氯硝基苯；6—δ-六六六；7—七氯；8—艾氏剂；9—p,p-滴滴伊；10—o,p-滴滴涕；11—p,p-滴滴滴，12—p,p-滴滴涕；13—环氧七氯(内标物)

色谱柱：SE 54，25m×0.22mm，d_f=0.33μm

柱　温：150℃(2min)→230℃(10min)，5℃・min^{-1}→250℃(10min)，10℃・min^{-1}

载　气：N_2　　　气化室温度：300℃

检测器：ECD　　　检测器温度：300℃

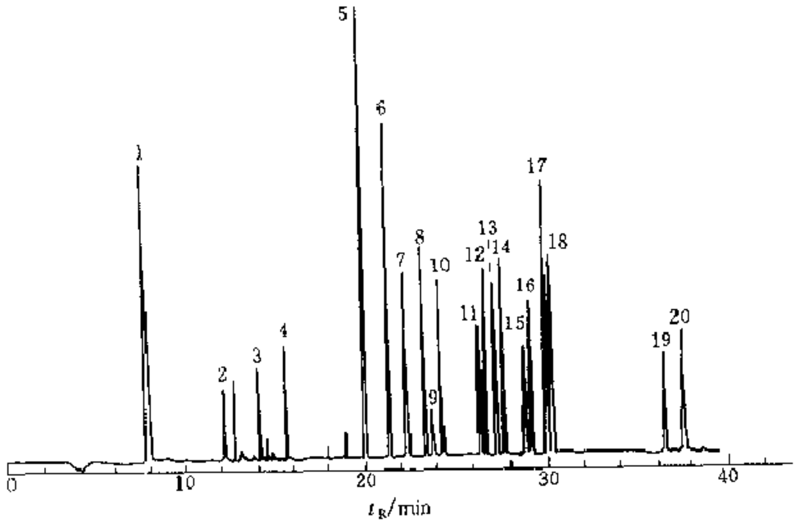


图 30-86　柑桔中有机磷农药[67]

色谱峰：1—敌百虫(2.0ng)；2—治螟磷(1.6ng)；3—敌敌畏(2.0ng)；4—甲胺磷(3.8ng)；5—甲拌磷(0.6ng)；6—二嗪农(1.5ng)；7—乙拌磷(0.8ng)；8—异稻瘟净(0.7ng)；9—久效磷(11.0ng)；10—乐果(2.0ng)；11—毒死蜱(0.5ng)；12—甲基对硫磷(2.0ng)；13—马拉硫磷(2.0ng)；14—杀螟硫磷(2.0ng)；15—乙基对硫磷(0.5ng)；16—甲基异柳磷(0.5ng)；17—水胺硫磷(2.0ng)；18—稻丰散(3.0ng)；19—乙硫磷(0.5ng)；20—三硫磷(1.9ng)

色谱柱：BP-10，25m×0.22mm

柱　温：60℃(2min)→200℃(0.2min)，10℃・min^{-1}→250℃(1min)，2℃・min^{-1}

载　气：N_2，17cm・s^{-1}　　　气化室温度：270℃

检测器：FPD　　　检测器温度：270℃



图 30-87　苹果中农药[71]

色谱峰：1—百菌清；2—烯菌酮；3—毒死蜱(内标物)；4—克菌丹；5—α-硫丹；6—β-硫丹

色谱柱：OV 101，25m×0.32mm，d_f=0.5μm

柱　温：190℃　　检测器：ECD

载　气：H_2，3ml·min^{-1}　　检测器温度：275℃

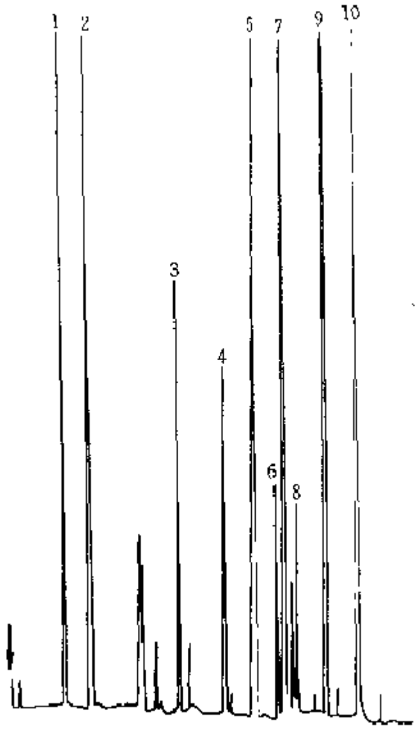


图 30-88　牛奶中有机氯农药[72]

色谱峰：1—六氯苯；2—林丹；3—艾氏剂；4—环氧七氯；5—p′滴滴伊；6—狄氏剂；7—p,p′-滴滴伊；8—异艾氏剂；9—o,p′-滴滴涕；10—p,p′-滴滴涕

色谱柱：SE-52，25m×0.32mm，d_f=0.15μm

柱　温：40℃(1min)→140℃，20℃·min^{-1}→220℃，3℃·min^{-1}

载　气：H_2，2ml·min^{-1}　　检测器：ECD

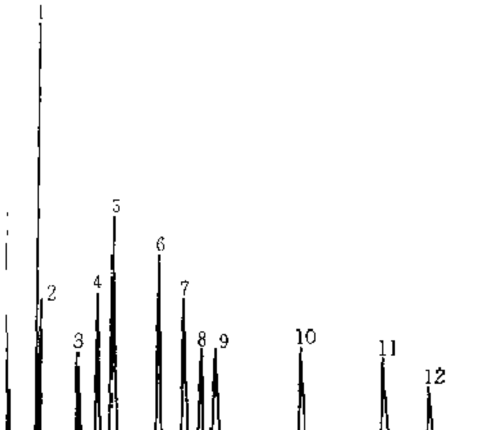


图 30-89　牛奶中有机磷农药(一)[73]

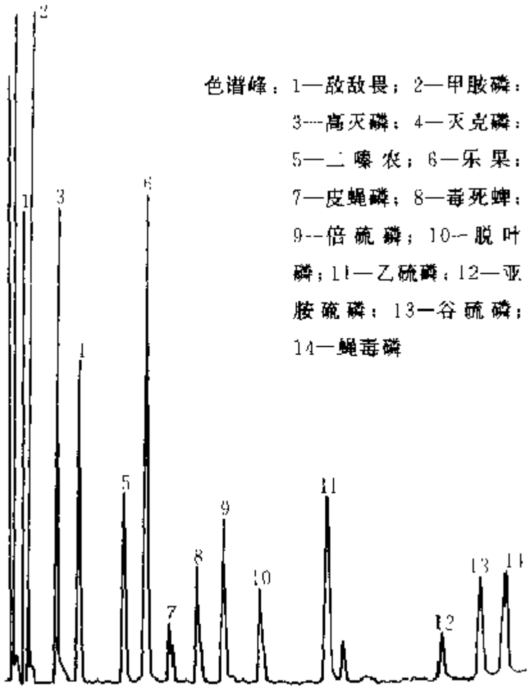
色谱峰：1—速灭磷 E；2—速灭磷 Z；3—甲基—◯五九 S；4—特丁磷；5—地虫磷；6—甲基一六◯五；7—马拉松；8—α-毒虫畏；9—β-毒虫畏；10—三磷磷；11—亚胺硫磷；12—氯亚磷

色谱柱：DB 17，30m×0.53mm，d_f=1.0μm

柱　温：150℃→250℃(5min)，3℃·min^{-1}

载　气：H_2

检测器：FPD (P 型)



色谱峰：1—敌敌畏；2—甲胺磷；3—高灭磷；4—灭克磷；5—二嗪农；6—乐果；7—皮蝇磷；8—毒死蜱；9—倍硫磷；10—脱叶磷；11—乙硫磷；12—亚胺硫磷；13—谷硫磷；14—蝇毒磷

图 30-90　牛奶中有机磷农药(二)[73]

色谱柱：DB-17，30m×0.53mm，d_f=1.0μm

柱　温：150℃→250℃(5min)，3℃·min^{-1}

载　气：H_2

检测器：FPD (P 型)

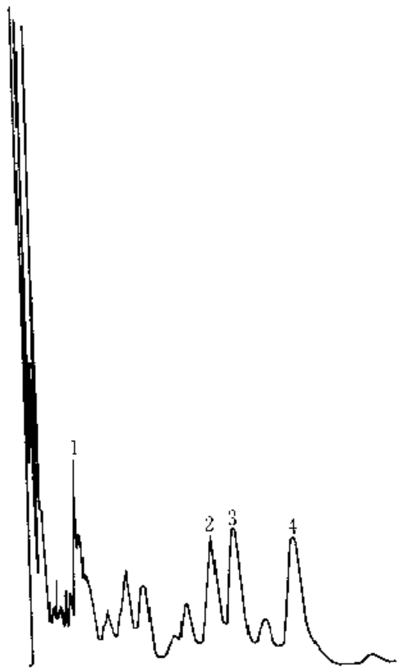


图 30-91　食品中多氯联苯[74]

色谱峰：1—PCB_3 主要峰；2～4—PCB_5 主要峰
色谱柱：3% OV 101，Chromosorb W AW-DMCS（80 目～100 目），2m×3mm
柱　温：210℃　　气化室温度：230℃
载　气：N_2　　检测器温度：250℃
检测器：ECD

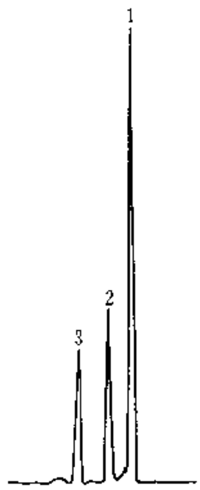


图 30-92　食品中锡[75]

色谱峰：1—氢化亚锡；2—氢化砷；3—氢化锗
色谱柱：GDX-104（80 目～100 目），3m×2mm
柱　温：60℃
载　气：N_2，20ml·min^{-1}
检测器：FPD
检测器温度：150℃

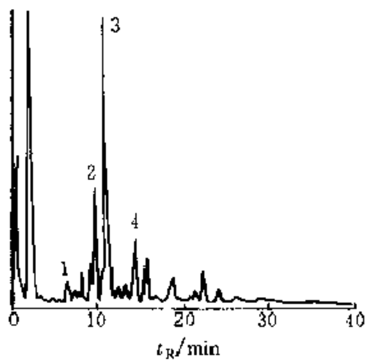


图 30-93　焙烤食品中甘油添加剂（TMS 衍生物）[76]

色谱峰：1—环状二甘油；2—线性二甘油；3—α-甲基葡萄糖苷(内标物)；4—三甘油
色谱柱：3% Dexsil 300，405 担体（80 目～100 目），0.5m×3mm
柱　温：90℃（2min）→340℃，8℃·min^{-1}
载　气：N_2，60ml·min^{-1}
检测器：FID

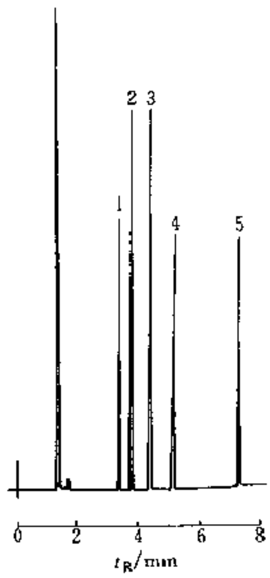
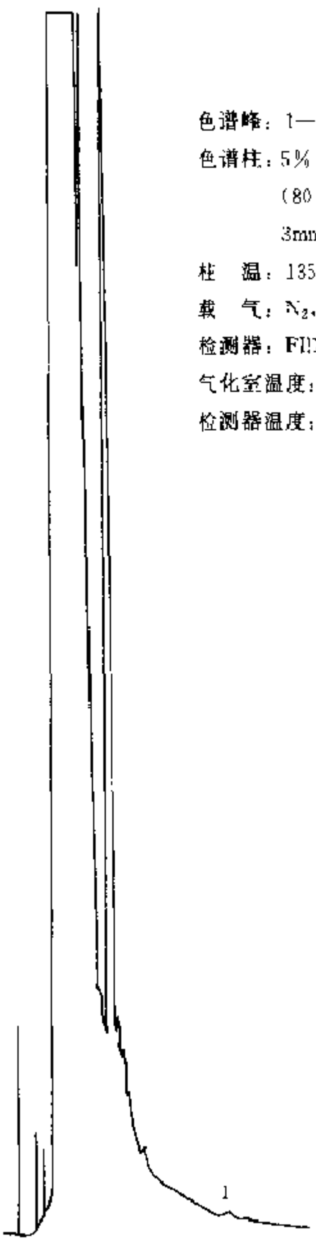


图 30-94　食品抗微生物剂[77]

色谱峰：1—甲基巴拉本；2—乙基巴拉本；3—丙基巴拉本；
1—丁基巴拉本；5—庚基巴拉本
色谱柱：BP5，25m×0.32mm，d_f=0.5μm
柱　温：160℃→280℃，15℃·min^{-1}
检测器：FID



色谱峰：1—黄樟素
色谱柱：5% SE 30，Chromosorb W（80 目～100 目），2m×3mm
柱 温：135℃
载 气：N_2，15ml·min^{-1}
检测器：FID
气化室温度：200℃
检测器温度：200℃

图 30-95 桉叶油中黄樟素[78]



图 30-96 酚类抗氧化剂[79]

色谱峰：1—叔丁基对羟基茴香醚；2—二叔丁基羟基甲苯
色谱柱：5% OV-17，Celite(60 目～80 目)，2m×3mm
柱 温：160℃
载 气：N_2，50ml·min^{-1}
检测器：FID
气化室温度：250℃
检测器温度：250℃

参 考 文 献

1 Shinohara A，Sato A，Ishii H，et al. Chromatographia，1991；32：358
2 李玫，薛献席. 第九次全国色谱学术报告会文集，1993：242
3 林正奎，华映芳. 植物学报，1986；28：299
4 Chrompack Inc. J Chrom Sci，1987；25：427
5 郭秀兰，吴英敏，葛全庭. 色谱，1990；8：396
6 Chrompack. The Chrompack General Catolog，1994：77～84

7 Supelco. Chromatography Products 1994，1994：692
8 康星武. 色谱，1992；10：176
9 J Chrom Sci，1988；26：85
10 Lipsky S R，McMurry W J. J Chromatogr，1984；289：129
11 Plank C，Lorbeer E，HRC，1993；16：483
12 Chrompack Inc. J Chrom Sci，1988；26：84
13 J&W Scientific. 1994～1995 Chromatography Catolog & Reference Guide，1995：170
14 胡述楫，胡人卫. 分析测试通报，1988；7（1）：28
15 王加宁，田玉增，关亚风等. 分析测试通报，1992，11（5）：37
16 张强. 色谱，1996；14：385
17 De Jong C，Badings H T. HRC，1990；13：94
18 J Chrom Sci，1987；25：428
19 Shimadzu. Application News，C180～0028
20 De Fruto M，Sanz J，Martinez-Castro I. Chromatographia，1988；25：861
21 Alonso L. Chromatographia，1993；35：649
22 Garcia Regueir J A，Diaz I，David F，et al. HRC，1994；17：181
23 Rarrer R，Herbery H. HRC，1992；15：585
24 Antonelli A，Camacchi A，Versari A. HRC，1994；17：553
25 修正佳，朱大模，许国旺等. 第十届全国色谱学术报告会文集，1995：236
26 史坚，周以宗，王融. 第六届全国色谱学术报告会文集，1987：197
27 Kolb B，Liebhardt B，Ettre L S. Chromatographia，1986；21：305
28 Morvai M，Molnar Perl I. Chromatographia，1992；34：502
29 Lee M L，Novotny M，Bartle K D. Anal Chem，1976；48：405
30 Moree-Testa P，Saint-Jalm Y，Testa A. J Chromatogr，1984；290：263
31 Grob K，Voellmin J A. J Chrom Sci，1970；8：218
32 Arrendale R F，Chortyk O T. HRC&CC，1985；8：62
33 蔡心尧，尹建军. 第十届全国色谱学术报告会文集，1995：258～259
34 程志青，吴惠勤，何守明等. 分析测试学报，1996；15（5）：8
35 贡献，陈周平. 气相色谱法与白酒分析. 四川：四川科学技术出版社，1989：150～206
36 吴惠勤，张桂英，何守明等. 分析测试学报，1996；15（4）：5
37 付玉书，胡国栋，龚书宝. 色谱，1985；3：111
38 胡国栋，程劲松，朱叶. 色谱，1994；12：265
39 张秀琴. 第五届全国色谱学术报告会文集，1985：345
40 邓瑞粹，顾寄寅，冯惠年等. 第一届全国毛细管色谱报告会文集，1984：405
41 张仲，张承聪. 第八次全国色谱学术报告会文集，1991：152
42 李杜，周继红，詹益兴. 色谱，1996；14：414
43 Supelco. Chromatography，26：11
44 J Chrom Sci，1991；29：221
45 Vasconcelos A M P，Chaves das H J，Neves. HRC，1990；13：494
46 Santa-Maria G，Olano A，Tejedor M，Chromatographia，1985；20：197
47 李浩春. 食品与发酵工业，1977；（1）：15
48 Vidal J P，Estreguil S，Cantagrel R. Chromatographia，1993；35：183
49 Viro M. Chromatographia，1984；19：448
50 J Chrom Sci，1992；30：153
51 刘峰，陆久瑞，蔡心尧等. 第八次全国色谱学术报告会文集，1991；246
52 Hewlett-Packard. Application Note，228：18
53 Jennings W G. Application of Glass Capillary Gas Chromatography. New York：Marcel Dekker，1981：555

54 SGE, Analytical Products Catalogue, 1993; 94; 64
55 李茂盛，邵令娴，金鑫荣. 色谱，1987；5：359
56 J Chrom Sci, 1993; 31: 488
57 史景江，胡永革，岳风岗等. 分析测试通报，1991；10（4）：81
58 曾晓雄，庞新文，汪琢成. 色谱，1990；8：169
59 林止奎，华映芳，谷豫江等. 色谱，1986；4：74
60 周县，魏宏，吴天送等. 色谱，1994；12：356
61 Ylipahkala T M, Jalonen J E. Chromatographia, 1992; 34: 159
62 Olano A, Calvo M M, Reglero G. Chromatographia, 1986; 21: 538
63 Barcarolo R, Casson P. HRC, 1995; 18: 5
64 赵文元，刘晓达，梁冰等. 分析测试通报，1990；9（4）：16
65 Telling G M. J Chromatogr, 1972: 73: 79
66 Gavinelli M, Airoldi L, Fanelli R. HRC & CC, 1986: 9: 257
67 牟峻，荣会，陈明岩等. 色谱，1996；14：478
68 季玉玲，王圣国，林国庆. 第六次全国色谱学术报告会文集，1987：312
69 庄无忌，周昱. 色谱，1994；12：203
70 王元鸿，荣会. 分析化学，1994；22；931
71 Bicchi C, Damato A, Tonutti I Chromatographia, 1985; 20; 219
72 Barcarolo R, Tealdo E, Tutta C. HRC & CC, 1988; 11; 539
73 Erney D R. HRC, 1995; 18: 59
74 GB 9675—88. 中国国家标准汇编，1992；120：176
75 丁天惠、张俊华、赵琪等. 色谱，1985；3：252
76 周卯星，黄利群. 分析测试通报，1992；11（3）：53
77 SGE. Analytical Products 1993/1994 Catalogue, 1994: 64
78 GB 10351--89. 中国国家标准汇编，1992；128：551
79 方建荣，洪玉箐，吴印德等. 水产食品化学分析手册. 上海：上海科学技术出版社，1993：339

（李浩春　李全洪）

第三十一章　农药色谱图

第一节　杀虫、杀螨、杀菌剂色谱图

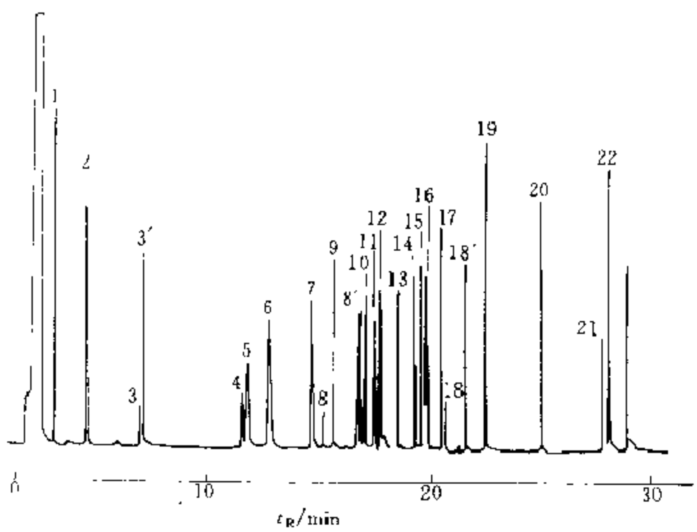


图 31-1　有机磷杀虫剂[1]

色谱峰：1—甲氟磷；2—敌敌畏；3，3′—速灭磷；4—二溴磷；5—百治磷；6—乐果；7—地虫磷；8，8′—磷胺；9—二嗪农；10—甲基对硫磷；11—氧马拉松；12—对氧磷；13—杀螟松；14—马拉松；15—乙基对硫磷；16—毒死蜱；17—溴硫磷；18，18′—毒虫畏；19—杀虫畏；20—乙硫磷；21—伏杀磷；22—乙基谷硫磷

色谱柱：OV-1；14.5m×0.25mm

柱　温：115℃→190℃，4℃·min^{-1}；→260℃，8℃·min^{-1}

载　气：H_2

检测器：NPD—P型

气化室温度：250℃

检测器温度：250℃

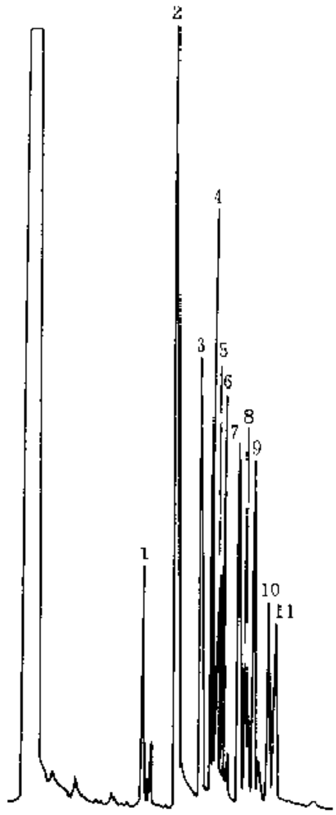


图 31-2　有机磷农药（一）[2]

色谱峰：1—敌敌畏—敌百虫；2—乙酰甲胺磷；3—氧化乐果；4—久效磷；5—治螟磷；6—乐果；7—稻瘟净十二噁唆；8—异稻瘟净；9—甲基对硫磷；10—马拉硫磷；11—对硫磷

色谱柱：SE-30；12m×0.32mm

柱　温：65℃(1min)→220℃(2min)，40℃·min^{-1}

载　气：N_2，2-3ml·min^{-1}

检测器：FPD

气化室温度：230℃

检测器温度：220℃

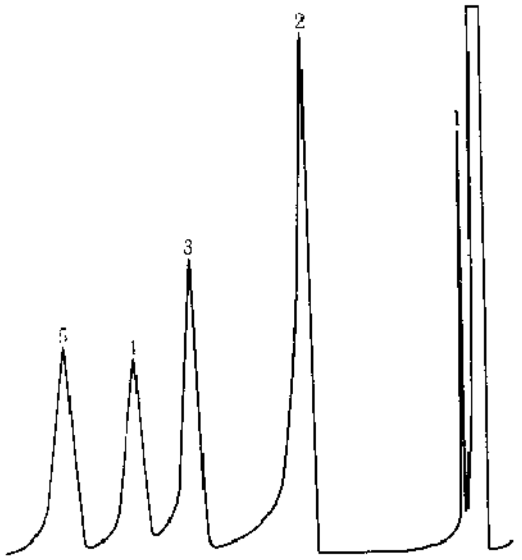


图 31-3　有机磷农药（二）[9]

色谱峰：1—敌敌畏(敌百虫)；2—乐果；3—甲基对硫磷；4—马拉硫磷；5—对硫磷

色谱柱：5% DC-200+7.5%QF-1，白色酸洗硅烷化硅藻土担体(质量比为 0.15～0.2)，2m×4mm

柱　温：170℃

载　气：N_2，60ml·min^{-1}

检测器：FPD

气化室温度：240℃

检测器温度：230℃

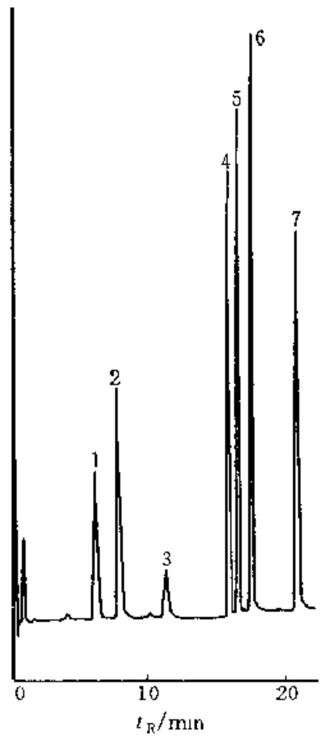


图 31-4　有机磷农药（三）[10]

色谱峰：1—敌敌畏；2—甲胺磷；3—敌百虫；4—乐果；5—甲基 1605；6—水胺硫磷；7—亚胺硫磷

色谱柱：OV-17（50%苯基甲基硅酮交联），10m×0.53mm，d_f=2.0μm

柱　温：80℃→140℃，5℃·min^{-1}→250℃，15℃·min^{-1}

载　气：N_2，20ml·min^{-1}

检测器：NPD-P 型

气化室温度：200℃

检测器温度：250℃



色谱峰：1—敌敌畏；2—杀抗松；3—乐果 4—杀螟腈；5—二嗪磷；6—乙拌磷；7—安果；8—异稻瘟净；9—除线磷；10—甲基对硫磷；11—甲基毒死蜱；12—杀螟硫磷；13—马拉硫磷；14—倍硫磷；15—毒死蜱；16—对硫磷；17—α-毒虫畏；18—β-毒虫畏；19—稻丰散；20—丙虫磷；21—杀扑磷；22—丙硫磷；23—异噁唑磷；24—乙硫磷；25—苯腈磷；26—克瘟散；27—打杀磷；28—苯硫磷；29—伏杀磷

色谱柱：CBJl，60m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱　温：60℃(2min)→180℃，20℃·min^{-1}→265℃，10℃·min^{-1}

载　气：He，1.2ml·min^{-1}

检测器：FPD（P 型）

气化室温度：240℃

检测器温度：270℃

图 31-5　农产品中有机磷农药[9]



图 31-6　久效磷[3]

色谱峰：1—邻苯二甲酸二丙酯(内标)；2—久效磷；3—氯久效磷

色谱柱：7%OV-17，Gas Chrom Q(80 目～100 目)，2m×3mm

柱　温：190℃

载　气：N_2，30ml・min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：220℃

检测器温度：230℃

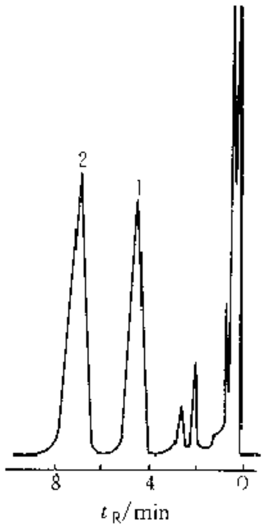


图 31-7　乙酰甲胺磷[5]

色谱峰：1—癸二腈(内标)；2—乙酰甲胺磷

色谱柱：3.6%聚二乙二醇丁二酸酯+1.5%氟橡胶Ⅰ，Gas Chrom Q (100 目～120 目)，0.42m×2mm

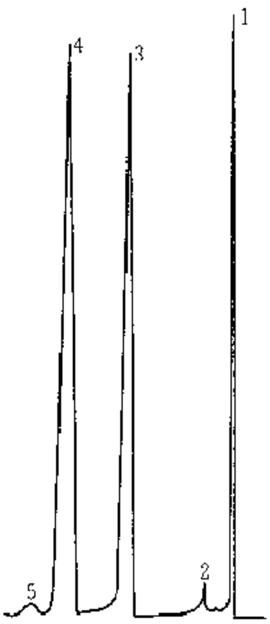
柱　温：156℃

载　气：N_2，28ml・min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：165℃

检测器温度：160℃



色谱峰：1—溶剂；2—对硝基苯酚；3—甲基对硫磷；4—p，p' DDE；5—s 甲基异构体

色谱柱：1.5%SE-30－1.5OV-210，Gas Chrom Q (60 目～80 目)，1.5m×4mm

柱　温：180℃

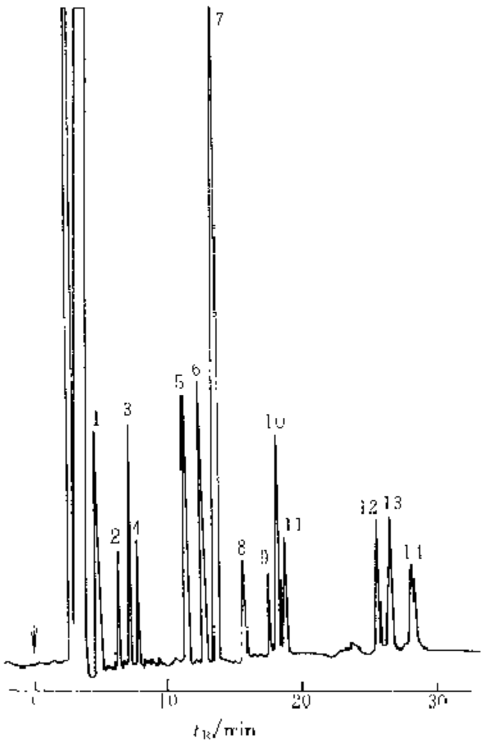
载　气：N_2，30ml・min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：210℃

检测器温度：250℃

图 31-8　甲基对硫磷乳油[6]



色谱峰：1—六氯苯；2—α-六六六；3—艾氏剂；4—γ-六六六；5—o,p'-DDE；6—α-硫丹；7—p,p'-DDE；8—狄氏剂；9—o,p'-DDT；10—异狄氏剂；11—o,p'-DDD；12—p,p'-DDT；13—p,p'-DDD；14—β-硫丹

色谱柱：OV-225、Cab-O-Sil；26.5m×0.4mm

柱　温：217℃

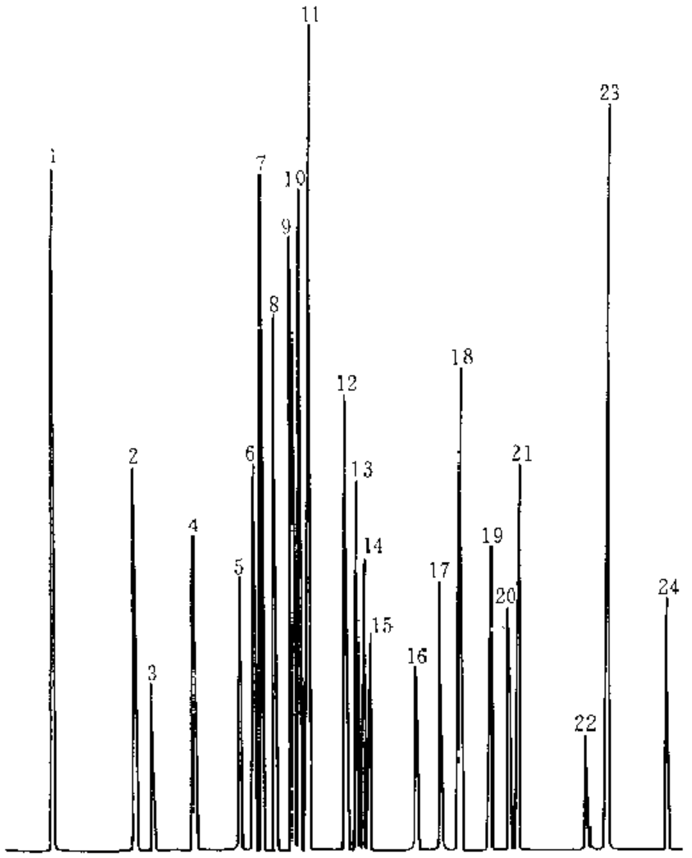
载　气：5% CH_4+95%Ar；25ml·min^{-1}

检测器：ECD

气化室温度：270℃

检测器温度：300℃

图 31-9　有机氯农药(一)[27]



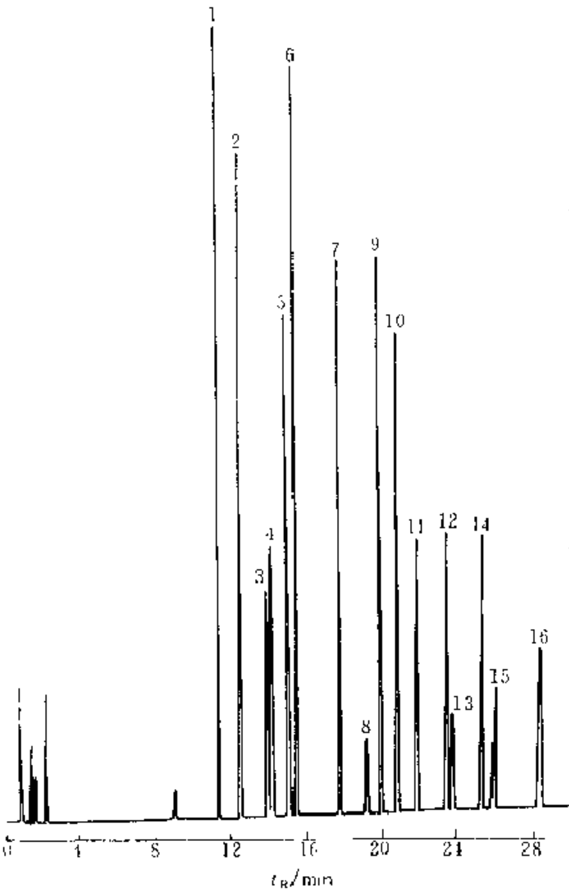
色谱峰：1—氯丹；2—七氯；3—艾氏剂；4—碳氯灵；5—氧化氯丹；6—光七氯；7—光六氯；8—七氯环氧化合物；9—反氯丹；10—反九氯；11—顺氯丹；12—狄氏剂；13—异狄氏剂；14—二氢灭蚁灵；15—p,p'-DDE；16—氯代灭蚁灵；17—开蓬；18—光艾氏剂；19—p,p'-DDT；20—灭蚁灵；21—异狄氏剂醛；22—异狄氏剂酮；23—甲氧DDT；24—光狄氏剂

色谱柱：OV-101，20m×0.24mm

柱　温：80℃→250℃，4℃·min^{-1}

检测器：ECD

图 31-10　有机氯农药(二)[13]



色谱峰：1—α-六六六；2—γ-六六六；3—β-六六六；4—七氯；5—δ-六六六；6—艾氏剂；7—环氧七氯；8—α-硫丹；9—4,4′-DDE；10—狄氏剂；11—异狄氏剂；12—4,4′-DDD；13—β-硫丹；14—4,4′-DDT；15—异狄氏剂醛；16—硫丹硫酸盐

色谱柱：DB-1301，30m×0.32mm，d_f=1.0μm

柱　温：70°C→200°C，20°C·min^{-1}→240°C，3°C·min^{-1}

载　气：H_2

检测器：ECD

气化室温度：250°C

检测器温度：280°C

图 31-11　有机氯农药(三)[14]

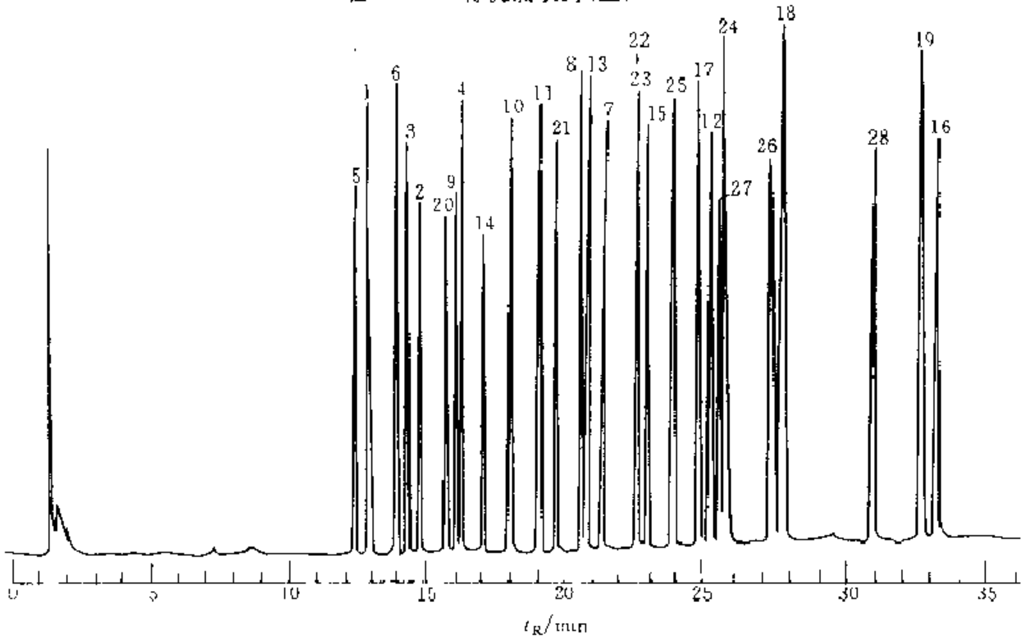


图 31-12　有机氯农药(四)[15]

色谱峰：1—α-六六六；2—β-六六六；3—γ-六六六；4—δ-六六六；5—六氯苯；6—六氯；7—α-氯丹；8—γ-氯丹；9—α-六氯；10—γ-八氯；11—氧化氯丹；12—顺九氯；13—反九氯；14—艾氏剂；15—狄氏剂；16—光狄氏剂；17—异狄氏剂；18—异狄氏剂醛；19—异狄氏剂酮；20—七氯；21—环氧七氯；22—p,p'-DDE；23—o,p'-DDE；24—p,p-DDD；25—o,p'-DDD；26—p,p'-DDT；27—o,p'-DDT；28—灭蚁灵

色谱柱：OV-17，25m×0.32mm，d_t=0.25μm　　检测器：ECD

柱　温：90°C(3min)→190°C，20°C·min^{-1}→274°C，3°C·min^{-1}　　气化室温度：290°C

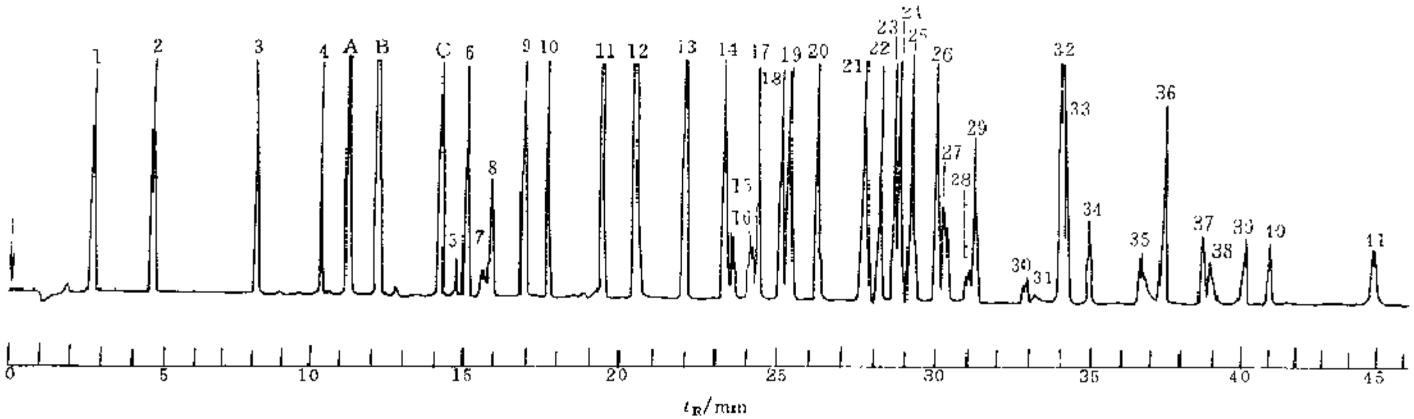


图 31-13 有机氯农药(五)[13]

色谱峰：1—二溴一氯丙烷；2—六氯环戊二烯；3—氯唑灵；4—草灭平；5—六氯苯；6—扑草胺；7—燕麦敌；8—氟乐灵；9—α-六六六；10—五氯硝基苯；11—γ-六六六；12—七氯；13—艾氏剂；14—草不绿；15—百菌清；16—β-六六六；17—异艾氏剂；18—敌草索；19—δ-六六六；20—环氧七氯；21—硫丹Ⅰ；22—γ-氯丹；23—α-氯丹；24—反九氯；25—p,p'-DDE；26—狄氏剂；27—克菌丹；28—乙滴滴；29—异狄氏剂；30—丙酯杀螨醇；31—乙酯杀螨醇+除草醚；32—p,p-DDD；33—p,p'-DDT；34—硫丹Ⅱ；35—异狄氏剂醇；36—灭蚁灵；37—硫丹硫酸盐；38—4,4-甲氧DDT；39—敌菌丹；40—异狄氏剂酮；41—反氯菊酯；A—2-溴联苯；B—α,α'-二溴间-二甲苯（内标）；C—4,4'-二溴八氟联苯(内标)

色谱柱：DB 1701，30m×0.53mm，d_f=1.0μm

柱　温：140℃（2min）→270℃（1min），2.8℃·min^{-1}

载　气：He，6ml·min^{-1}

检测器：ECD

气化室温度：250℃

检测器温度：320℃

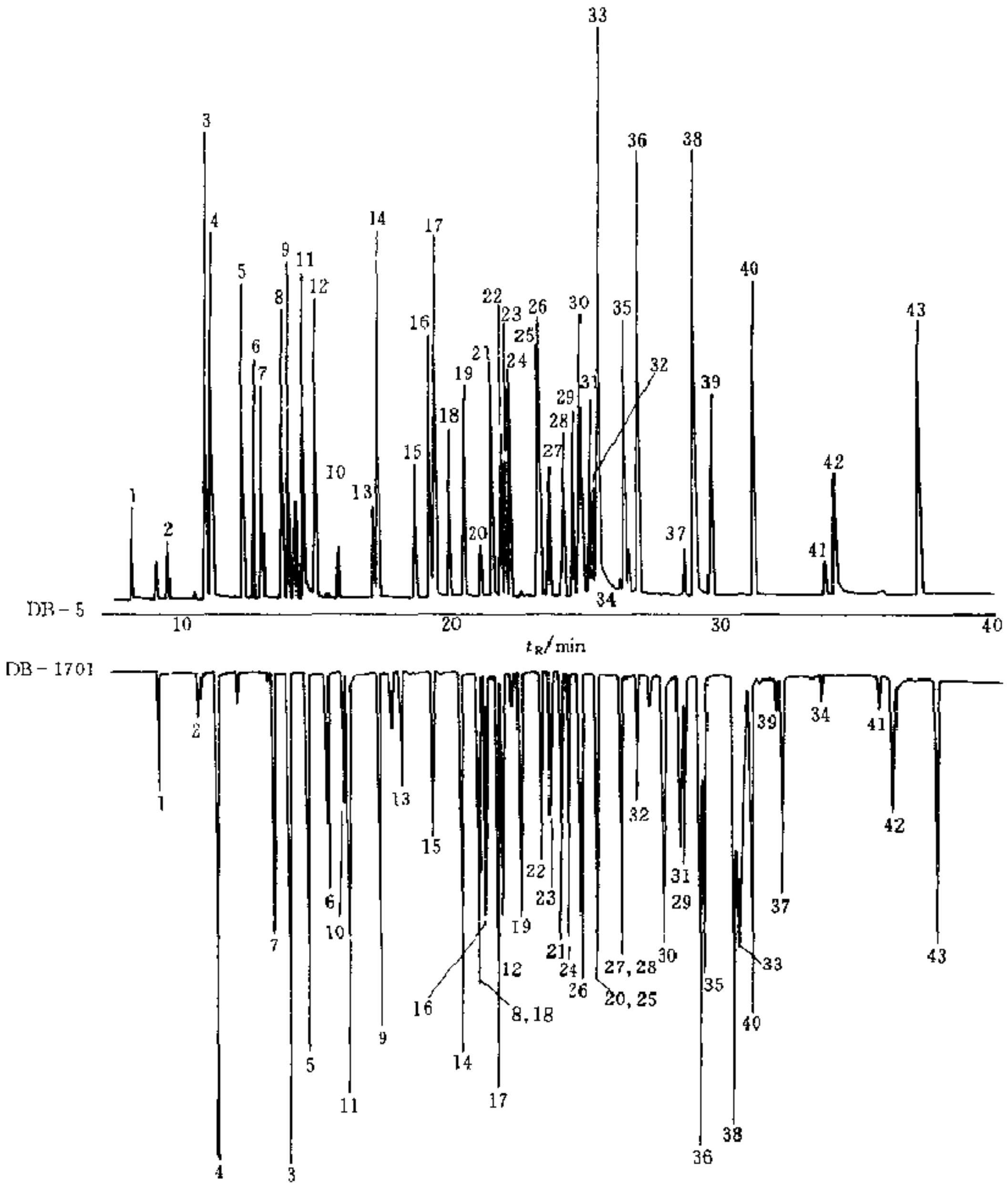


图 31-14　有机氯农药(六)[19]

色谱峰：1—氯唑灵；2—地茂散；3—毒草安；4—四氯对二甲苯；5—氟乐灵；6—α-六六六；7—六氯苯；8—β-六六六；9—γ-六六六；10—五氯硝基苯；11—p,p'-二氯联苯；12—δ-六六六；13—七氯；14—草不绿；15—艾氏剂；16—毒死蜱；17—敌草索；18—异艾氏剂；19—环氧七氯；20—克菌丹；21—γ-氯丹；22—o,p'—DDE；23—硫丹Ⅰ；24—α氯丹；25—狄氏剂；26—p,p'-DDE；27—o,p'-DDD；28—异狄氏剂；29—硫丹Ⅱ；30—乙酯杀螨醇；31—p,p'-DDD；32—o,p'-DDT；33—异狄氏剂醛；34—异狄氏剂酮；35—三硫磷；36—p,p'-DDT；37—硫丹硫酸盐；38—六溴苯；39—甲氧DDT；40—灭蚁灵；41—顺氯菊酯；42—反氯菊酯；43—脱氯联苯

色谱柱：DB-5，30m×0.32mm，d_f=0.25μm；DB-1701，30m×0.32mm，d_f=0.21μm

柱　温：60℃ (0.5min)→140℃，20℃·min^{-1}→280℃

载　气：He，29.2cm·s^{-1}(150℃)

检测器：ECD

气化室温度：200℃

检测器温度：325℃

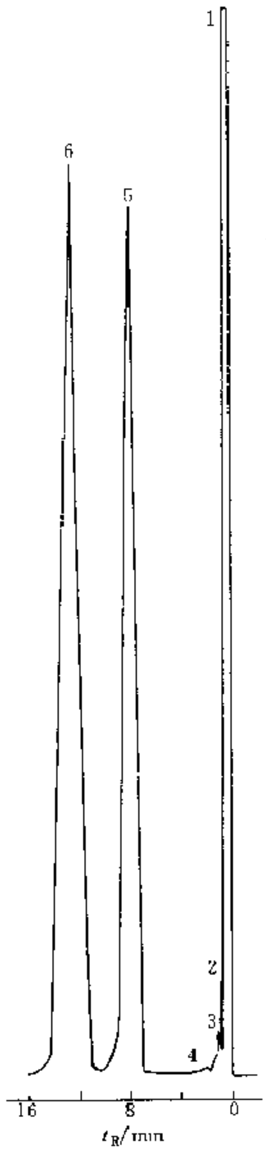


图 31-15 乐果[illegible]

色谱峰：1—$CHCl_3$；2—$(CH_3O)_3PS$；3—$(CH_3O)_2PO(SCH_3)$；4—$(CH_3O)_2PSSCOOCH_3$；5—乐果；6—邻苯二甲酸二丁酯(内标)

色谱柱：OV-17，Chromosorb G AW-DMCS (80 目～100 目)，1m×0.3mm

柱 温：180℃

载 气：N_2，[illegible]ml · min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：230℃

检测器温度：230℃

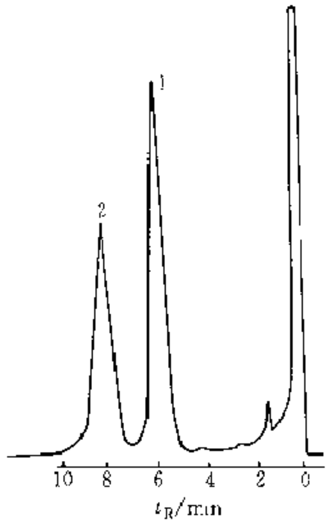


图 31-16 氧乐果[1]

色谱峰：1—邻苯二甲酸二丁酯(内标)；2—氧乐果

色谱柱：3%XE 60，上海试剂厂 102 酸洗硅烷化担体经用 Carbowax 20M 键合处理 (80 目～100 目)，0.65m×2mm

柱 温：150℃

载 气：N_2，25ml · min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：200℃

检测器温度：180℃

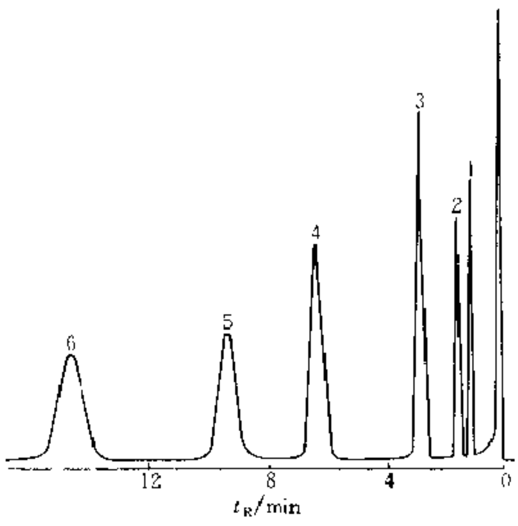


图 31-17 农药(一)[22]

色谱峰：1—二硝基甲酚；2—地乐酚；3—溴苯腈；4—消螨酚；5—碘苯腈；6—敌螨普

色谱柱：3%丁二酸环己烷二甲醇酯+1%H_3PO_4，Chromosorb W (60 目～80 目)；80cm×3mm

柱 温：200℃

载 气：H_2

检测器：FID

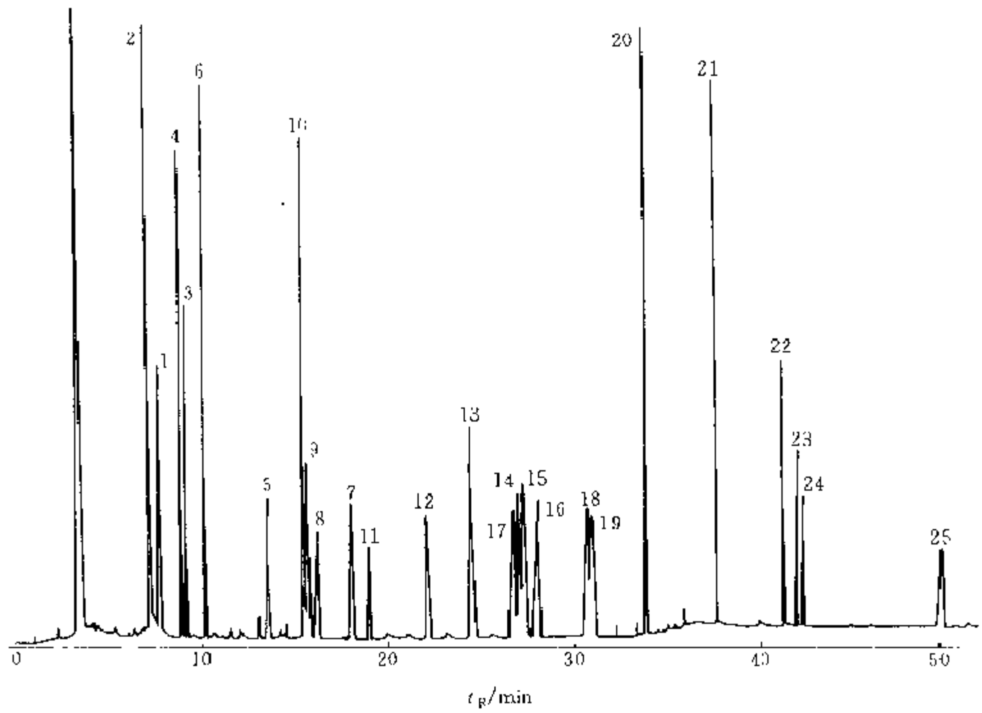


图 31-18 农药(二)[11]

色谱峰：1—甲胺磷；2—敌敌畏；3—敌百虫；4—速灭磷；5—氧乐果；6—氟乐灵；7—乐果；8—西玛津；9—阿特拉津；10—二嗪哝；11—除线磷；12—甲基毒死蜱；13—虫螨磷；14—杀螟松；15—马拉松；16—对硫磷；17—乙基毒死蜱；18—倍硫磷；19—溴硫磷；20—乙基溴硫磷；21—三唑磷；22—谷硫磷；23—乙基谷硫磷；24—蝇毒磷；25—δ迈秋灵

色谱柱：50%二苯基二甲基硅氧烷，55m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱 温：50°C→195°C(28min)，35°C·min^{-1}→280°C(15min)，35°C·min^{-1}

载 气：He，30cm·s^{-1}　　气化室温度：250°C

检测器：FID　　检测器温度：300°C

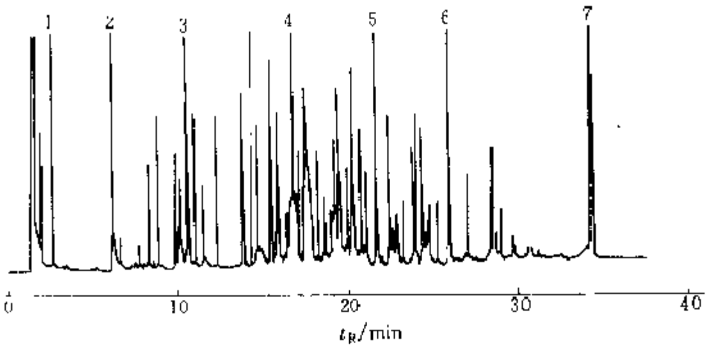


图 31-19 农药(三)

色谱峰：1—三正丙基胺；2—三正丁基胺；3—三正戊基胺；4—三正己基胺；5—三正庚基胺；6—三正辛基胺；7—三正癸基胺

色谱柱：DB-1，30m×0.25mm

柱 温：100°C(3min)→275°C，6°C·min^{-1}

载 气：He，21.3cm·s^{-1}

检测器：FID

色谱峰：1—乐斯本；2—稻丰散；3—克螨特；4—灭扫利；5—功夫；6—氯氰菊酯；7—来福灵；8—溴氰菊酯

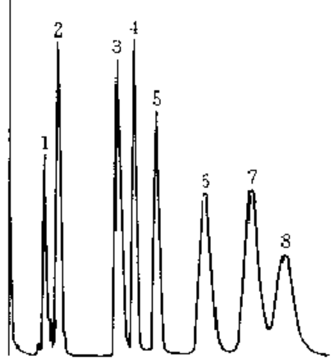


图 31-20 农药(四)[12]

色谱柱：3% OV-101，Gas Chrom Q (80目~100目)，1m×3.2mm

柱 温：200°C(2min)→240°C，10°C·min^{-1}

载 气：N_2，60ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：260°C

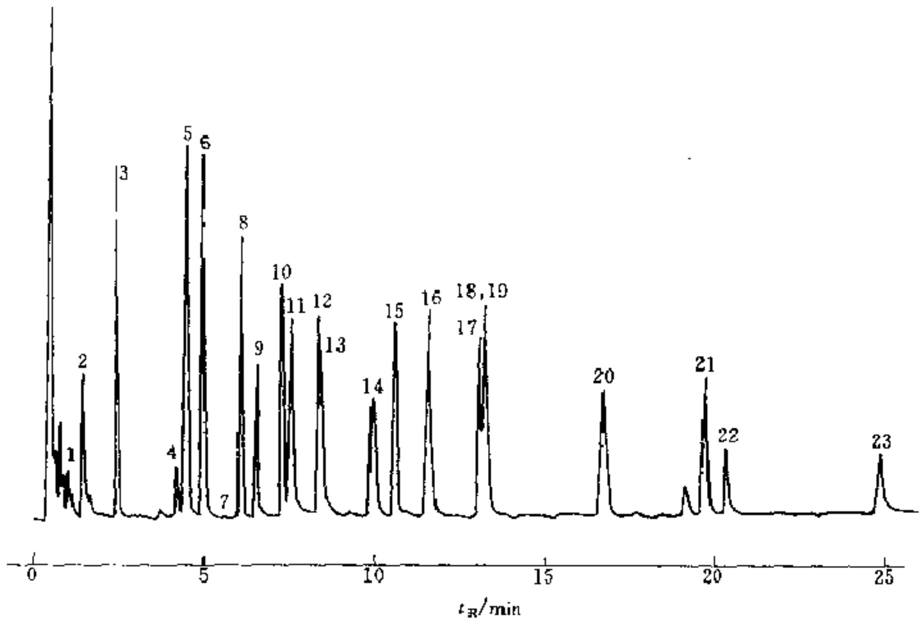


图 31-21　农药——US EPA 方法 IP-8[16]

色谱峰：1—敌敌畏；2—2,4,5-三氯酚；3—五氯苯；4—2,4-滴甲基酯；5—六氯苯；6—α-六六六；7—五氯酚；8—林丹；9—β-六六六；10—七氯；11—百菌清；12—艾氏剂；13—皮蝇磷；14—毒死蜱；15—环氧七氯；16—反九氯；17—狄氏剂；18—克菌丹；19—4,4'-DDE；20—4,4'-DDT；21—灭蚁灵；22—甲氧 DDT；23—八氯萘

色谱柱：SPB-608，30m×0.53mm，d_f=0.5μm　　载　气：He，7ml・min⁻¹

柱　温：150℃(1min)→270℃，4℃・min⁻¹　　检测器：ECD

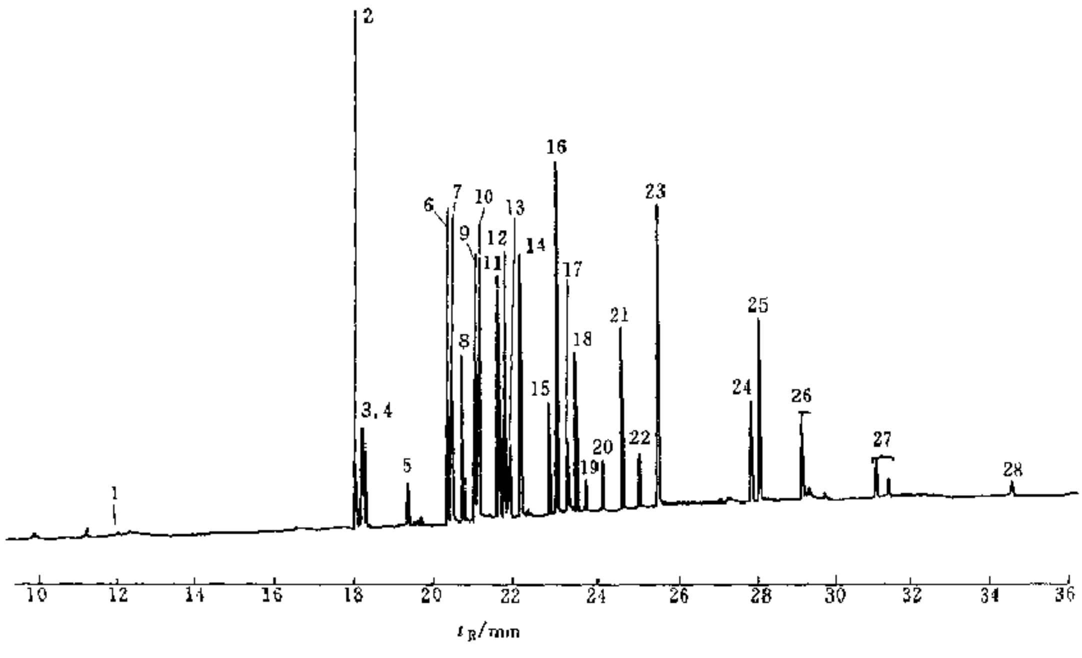


图 31-22　农产品中农药(一)[20]

色谱峰：1—丁酰肼；2—灭克磷；3—噁虫威；4—氯苯胺灵；5—促长啉；6—氯嘧啶磷；7—抗蚜威；8—嗪草酮；9—甲基对硫磷；10—甲基毒死蜱；11—杀螟硫磷；12—马拉硫磷；13—抑菌灵；14—毒死蜱；15—胺硝草；16—喹硫磷；17—蚜灭多；18—灭螨猛；19—氟纹胺；21—丰索磷；23—克瘟散；25—双甲脒；20，22，24，26～28—未定

色谱柱：CBJ1，60m×0.25mm，d_f=0.25μm　　检测器：FTD

柱　温：50℃(1min)→290℃，10℃・min⁻¹　　气化室温度：290℃

载　气：He　　检测器温度：290℃

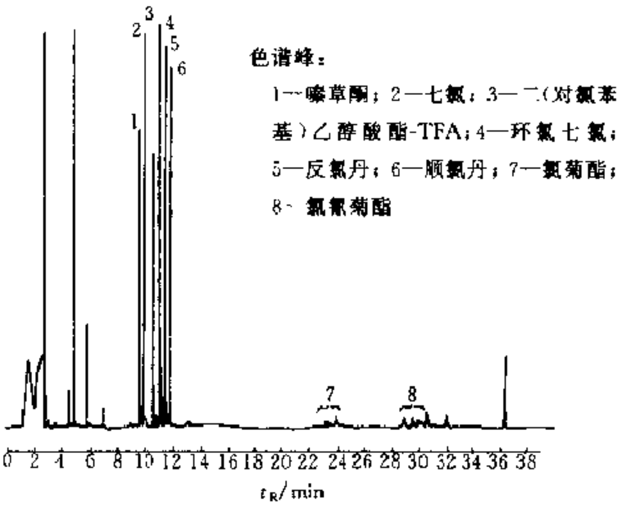


图 31-23 农产品中农药(二)[20]

色谱柱：CBJ5，30m×0.25mm，d_f=0.25μm
柱　温：80℃(1min)→240℃(22min)，20℃·min^{-1}→360℃，10℃·min^{-1}
载　气：He
检测器：ECD
气化室温度：300℃
检测器温度：300℃

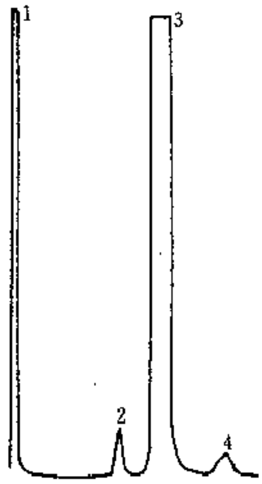


图 31-24 林丹[17]

色谱峰：1—溶剂；2—α-六六六；3—γ-六六六；4—δ-六六六
色谱柱：2% OV-17，Chromosorb W AW-DMCS (60目～80目)，2m×3mm
柱　温：180℃
载　气：N_2，50ml·min^{-1}
检测器：FID
气化室温度：240℃

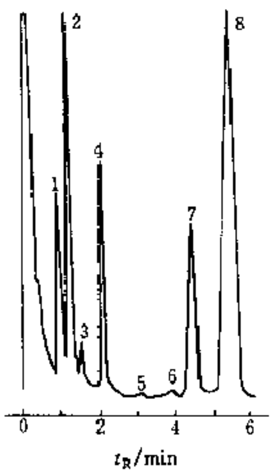


图 31-25 三氯杀螨醇乳油[21]

色谱峰：1—双对氯苯甲酮；2—o,p'-DDE；3—p,p'-DDE；4—o,p'-DDT；5—p,p'-DDT；6—未知物；7—Cl-DDT；8—三氯杀螨醇
色谱柱：OV 17，10m×0.53mm，d_f=2.0μm
柱　温：190℃
载　气：H_2，25ml·min^{-1}
检测器：FID
气化室温度：250℃
检测器温度：250℃

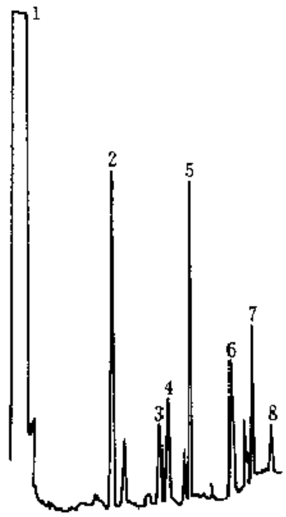


图 31-26 除虫菊酯[27]

色谱峰：1—正己烷(溶剂)；2—邻苯二甲酸二丁酯(内标)；3—除虫菊素Ⅰ；4—瓜叶菊素Ⅰ；5—茉酮菊素Ⅰ；6—除虫菊素Ⅱ；7—瓜叶菊素Ⅱ；8—茉酮菊素Ⅱ
色谱柱：OV-1，19m×0.32mm
柱　温：120℃→220℃，3℃·min^{-1}
载　气：N_2，60ml·min^{-1}；分流比=70∶1
检测器：FID
气化室温度：250℃
检测器温度：240℃



图 31-27 多来宝衍生物[28]

色谱峰：1—3-苯氧基苄基碘
色谱柱：3% OV-17，Gas Chrom Q (80目～100目)，2m×3mm
柱　温：220℃
载　气：N_2，65ml·min^{-1}
检测器：ECD
气化室温度：275℃
检测器温度：275℃

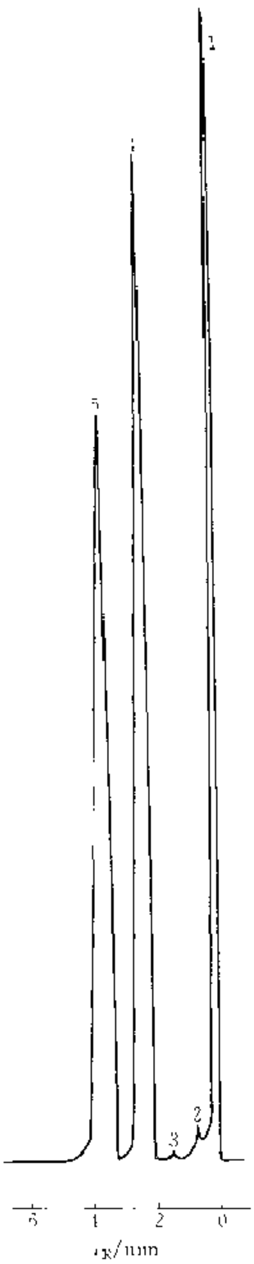


图 31-28 异丙威乳油[24]

色谱峰：1—丙酮(溶剂)；2—邻异丙基酚；3—杂质；4—邻苯二甲酸二甲酯(内标)；5—异丙威

色谱柱：10% OV-101，Chromosorb G AW-DMCS（60 目～80 目），0.5m×2.5mm

柱 温：136℃

载 气：H_2，15ml·min⁻¹

检测器：FID

气化室温度：150℃

检测器温度：150℃



图 31-29 速灭威乳油[25]

色谱峰：1—溶剂；2—间甲酚；3—氯甲酚；4—杂质；5—速灭威；6—邻苯二甲酸二乙酯中的杂质；7—邻苯二甲酸二乙酯(内标)

色谱柱：10% OV-101，Chromosorb G AW-DMCS（60 目～80 目），0.5m×2.5mm

柱 温：136℃

载 气：H_2，15ml·min⁻¹

检测器：FID

气化室温度：150℃

检测器温度：150℃



色谱峰：1—百菌清；2—瑞毒霉；3—富士一号；4—速克灵；5—扑海因

色谱柱：3% OV-101，Gas Chrom Q（80目～100目），1m×3.2mm

柱　温：180℃（4min）→240℃，5℃·min^{-1}

载　气：N_2，60ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：260℃

图 31-30　杀菌剂（一）[28]

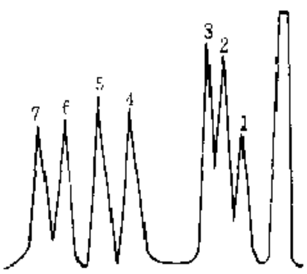


图 31-31　杀菌剂（二）[29]

色谱峰：1—甲基托布津；2—稻瘟净；3—异稻瘟净；4—灭菌丹；5—稻瘟灵；6—三环唑；7—克瘟散

色谱柱：5% SE-30，Chromosorb G AW DMCS（60目～80目），1m×2mm

柱　温：160℃→230℃

载　气：H_2，40ml·min^{-1}

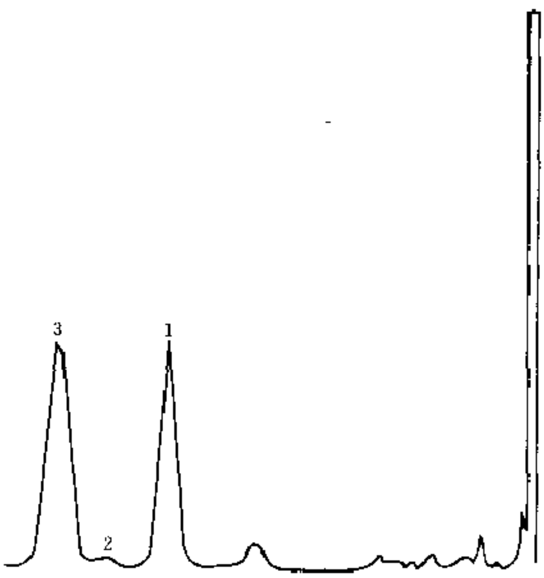


图 31-32　百菌清可湿性粉剂[30]

色谱峰：1—邻二苯基苯；2—四氯对苯二甲腈；3—百菌清

色谱柱：5.3% OV-17＋1.2% OV-225，Chromosorb W AW-DMCS（80目～100目），2m×4mm

柱　温：195℃

载　气：N_2，50ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：280℃

检测器温度：280℃

第二节　除草剂色谱图

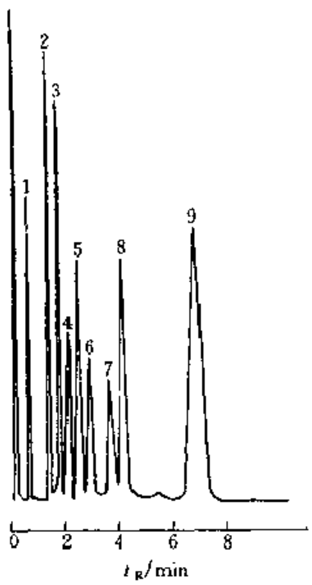


图 31-33　除草剂(一)[31]

色谱峰：1—敌草腈；2—氟乐灵；3—2,4-滴丁酸；4—扑灭津；5—阿特拉津；6—西玛三嗪；7—涕丙酸甲酯；8—2,4,5-涕丙酸；9—敌稗

色谱柱：0.26% SP-1000，低表面积石墨炭黑（80 目～100 目），1m×2mm

柱　温：240℃

检测器：FID

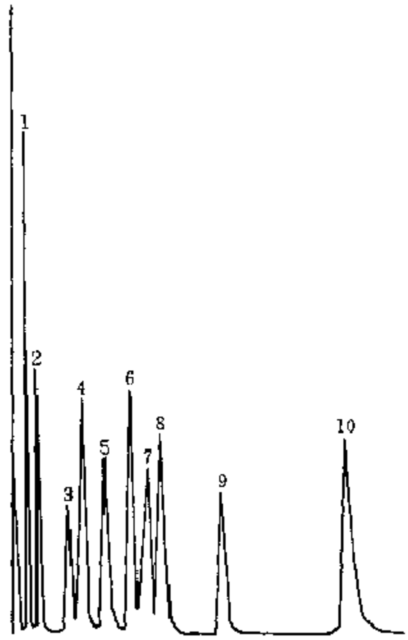


图 31-34　除草剂(二)[26]

色谱峰：1—禾大壮；2—氟乐灵；3—西草净；4—杀草丹；5—戊草净；6—灭草特；7—农思它；8—稳杀得；9—盖草能；10—禾草克

色谱柱：3% OV-101，Gas Chrom Q（80 目～100 目），1m×3.2mm

柱　温：180℃（4min）→240℃，5℃·min^{-1}

载　气：N_2，60ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：260℃

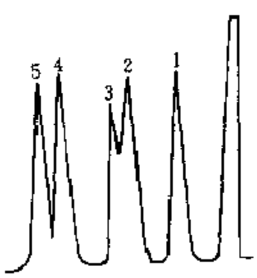


图 31-35　除草剂(三)[29]

色谱峰：1—阿特拉津；2—扑草净；3—杀草丹；4—丁草胺；5—除草醚

色谱柱：5% SE-30，Chromosorb G AW DMCS（60 目～80 目），1m×2mm

柱　温：160℃→230℃

载　气：H_2，30ml·min^{-1}

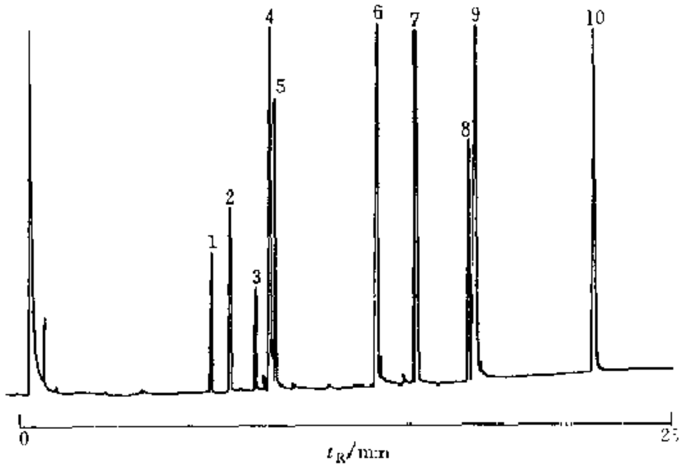


图 31-36　除草剂(四)[18]

色谱峰：1—三九一一；2—灭克磷；3—特丁磷；4—阿特拉津；5—地虫磷；6—毒草安；7—毒死稗；8—草不绿；9—丙草安；10—草净津

色谱柱：DB-210，30m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱　温：140℃→215℃，3℃·min^{-1}

载　气：He，35cm·s^{-1}

检测器：ECD

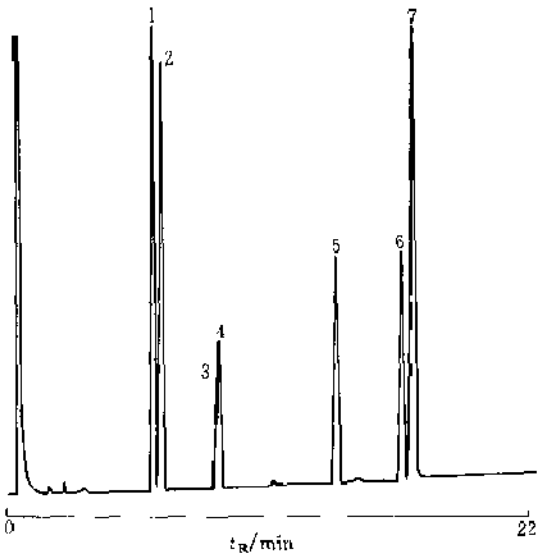


图 31-37 除草剂(五)[14]

色谱峰：1—氟乐灵；2—草克死；3—西玛津；4—阿特拉津；5—扑草净；6—敌草索；7—敌稗

色谱柱：DB-1301，30m×0.53mm，d_f=1.0μm

柱 温：160℃ (1min) →225℃，3℃·min^{-1}

载 气：He，11ml·min^{-1}

检测器：FID

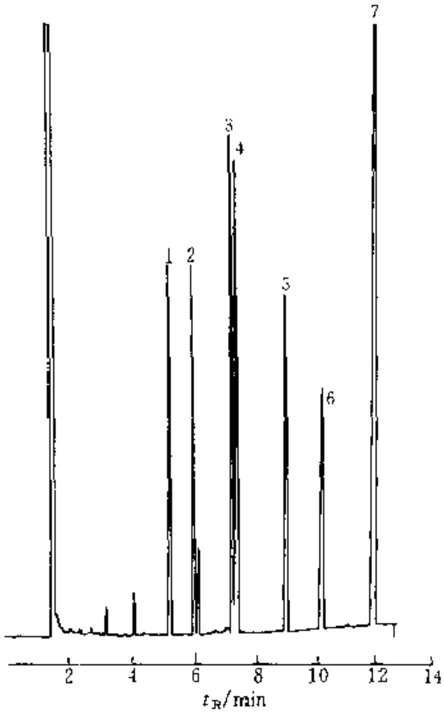


图 31-38 除草剂(六)[14]

色谱峰：1—氟乐灵；2—草克死；3—西玛津；4—阿特拉津；5—扑草净；6—敌草索；7—敌稗

色谱柱：BP10，25m×0.53mm，d_f=1.0μm

柱 温：190℃→240℃，4℃·min^{-1}

检测器：FID

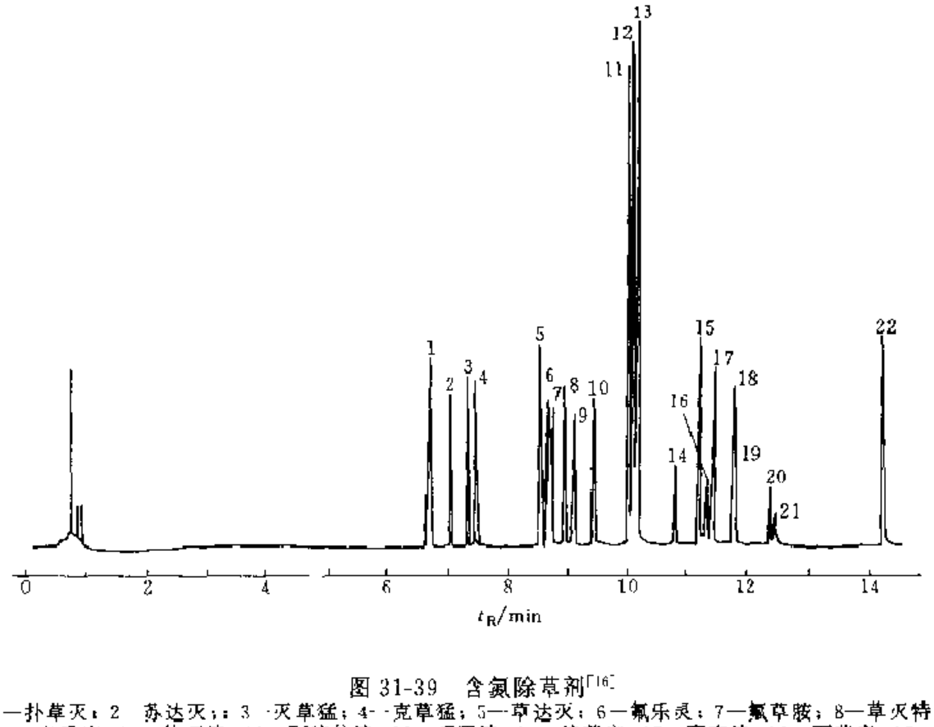


图 31-39 含氮除草剂[16]

色谱峰：1—扑草灭；2—苏达灭；3—灭草猛；4—克草猛；5—草达灭；6—氟乐灵；7—氟草胺；8—草灭特；9—扑草胺；10—卡乐施；11—扑灭津；12—阿特拉津；13—西玛津；14—特草定；15—赛克津；16—丙草安；17—异乐灵；18—胺硝草；19—除草定；20—恶草灵；21—氟硝草醚；22—六嗪同

色谱柱：Sup Herb，15m×0.53mm，d_f=0.5μm　　检测器：NPD

柱 温：60℃ (1min) →290℃ (5min)，16℃·min^{-1}　　检测器温度：310℃

载 气：He，5ml·min^{-1} (120℃)

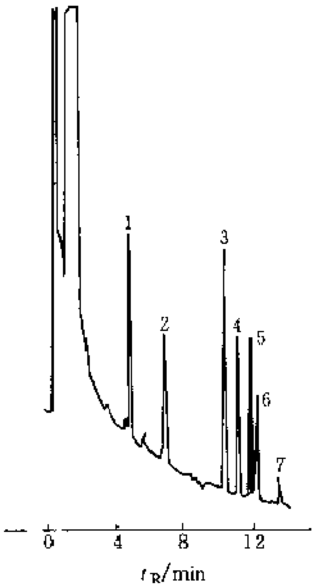


图 31-40 苯脲除草剂[32]

色谱峰：1—异丙隆；2—甲氧隆；3—绿谷隆；4—秀谷隆；5—枯草隆；6—利谷隆；7—氯溴隆

色谱柱：OV-1，14m×0.3mm

柱 温：60℃（1min）→95℃，10℃·min^{-1}→175℃（10min），12℃·min^{-1}

载 气：H_2，3ml·min^{-1}

检测器：NPD

气化室温度：200℃

检测器温度：250℃

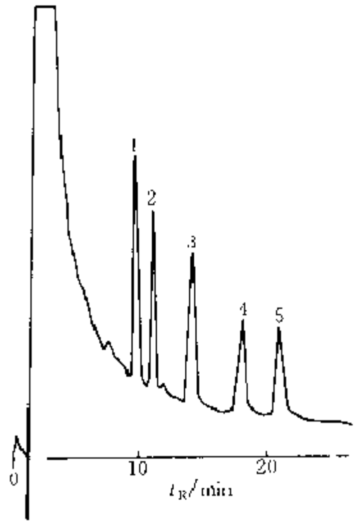


图 31-41 酸性除草剂[34]

色谱峰：1—2-甲基-4-氯丙酸；2—麦草畏；3—2-甲基-4-氯；4—定草酯；5—2,4-D

色谱柱：5%XE-60，2m

柱 温：200℃

检测器：ECD

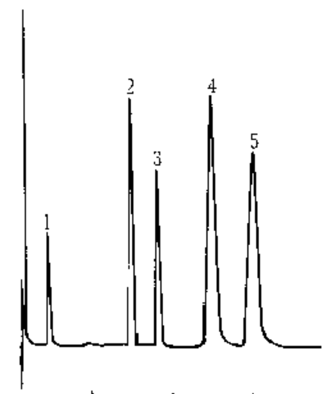


图 31-42 中性除草剂[34]

色谱峰：1—敌草腈；2—拿草特；3—芽根灵；4—甲基胺草灵；5—草胺膦

色谱柱：3%SE-30，2m

柱 温：200℃→230℃，5℃·min^{-1}

检测器：FTD

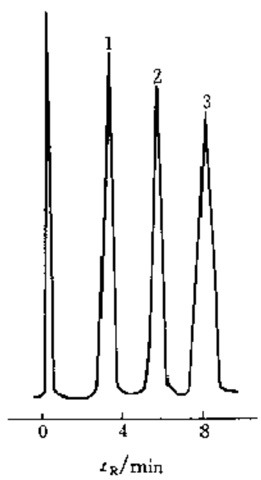


图 31-43 苯氧乙酸[36]

色谱峰：1—对-氯苯氧乙酸；2—2,4-二氯苯氧乙酸；3—邻苯二甲酸二壬酯

色谱柱：5%新戊二醇己二酸聚酯+1%磷酸，Chromosorb G AW DMCS（0.18mm～0.25mm），1m×2mm

柱 温：230℃

载 气：H_2，35ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：260℃

检测器温度：260℃

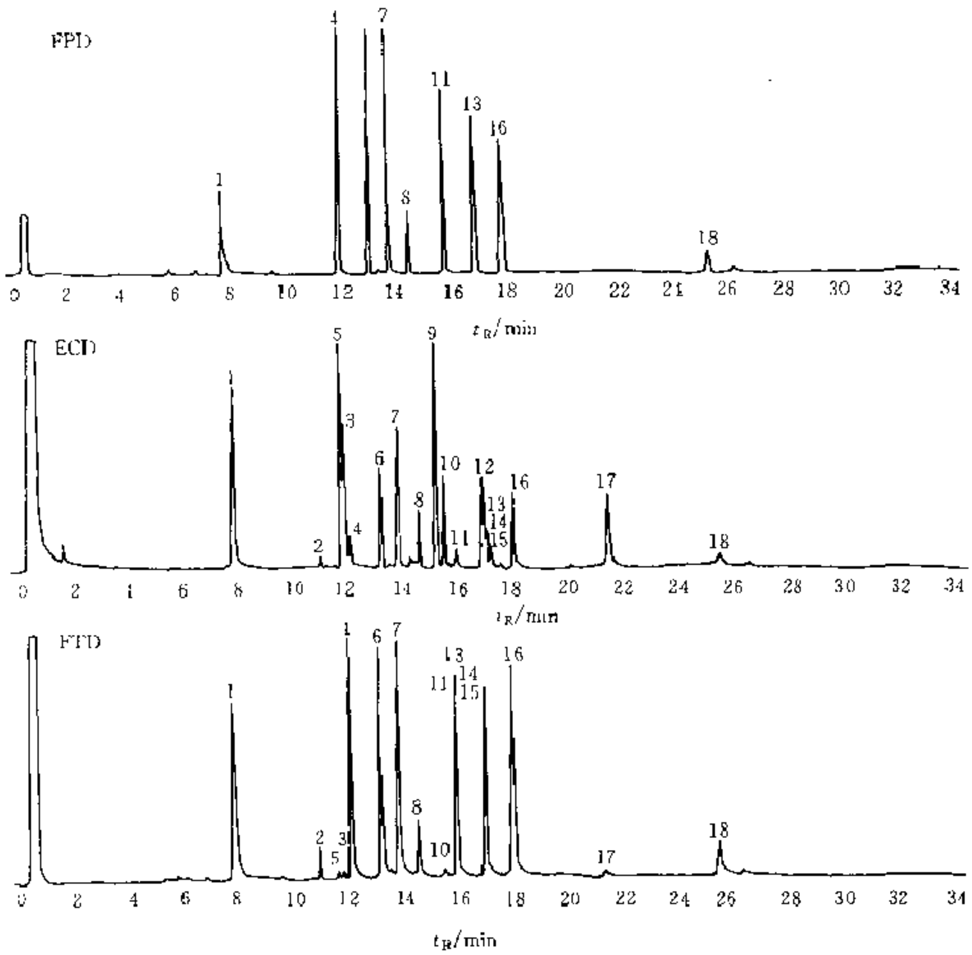


图 31·44 高尔夫球场用农药[35]

色谱峰：1—敌百虫；2—西玛津；3—拿草特；4—二嗪农；5,6,7—杀螟松；8—毒死蜱；9—克菌丹；10—胺硝草；11—丙胺磷；12—富士一号；13—草胺磷；14,15—草萘胺；16—异噁唑磷；17—异丙定；18—地散磷

色谱柱：CBJI，30m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱 温：50℃（1min）→120℃，20℃·min⁻¹→180℃，10℃·min⁻¹→300℃，5℃·min⁻¹

载 气：He

检测器：FPD，ECD 和 FTD(并联使用)

气化室温度：240℃

检测器温度：300℃

参 考 文 献

1 Wolf M，Delru R，Copin A. HRC & CC，1981；4：346

2 陈泉. 全国第三届毛细管色谱报告会文集，1988：178

3 GB 6690—86. 中国国家标准汇编，1990；75：336

4 GB 6696—86. 中国国家标准汇编，1990；75：357

5 GB 6698—86. 中国国家标准汇编，1990；75：367

6 GB 9550—88. 中国国家标准汇编，1990；115：271

7 GB 9558—88. 中国国家标准汇编，1992；115：309

8 GB 13192—91. 中国国家标准汇编，1993；166：381

9 Shimadzu. Application News，C180 0046

10 何抗生，茹赤峰，储晓刚. 第十次全国色谱学术报告会文集，1995：160

11 Sppola E，David F，Sandra P. HRC，1995：18；111

12 Cramers C A, Vermeer E A, Franken J. Chromatographia, 1977; 10: 412
13 Onuska F I. HRC & CC, 1984; 7: 660
14 Mehrar M F. HRC & CC, 1985; 8: 713
15 Suzukiand M, Morimoto M. HRC & CC, 1986; 9: 692
16 Supelco. Chromatography Products 1994; 1994; 685～754
17 GB 9559—88. 中国国家标准汇编, 1992; 115: 317
18 Lopez Avila V, Benedicto J, Baldin E, et al HRC, 1992; 15: 324
19 J&W Scientific. 1994-95 Chromatography Catolog & Reference Guide, 1995: 123～128
20 Shimadzu. Application News, C180-0073
21 毕富春, 王文丽. 色谱, 1995; 13: 281
22 Hrivank J, Stota Z. J Gas Chrom, 1968; 6: 9
23 Hall G L, Whitehead W E, Moucer C R, et al. HRC & CC, 1986; 9: 266
24 GB 9561—88. 中国国家标准汇编, 1992; 115: 332
25 GB 9564—88. 中国国家标准汇编, 1992; 115: 359
26 李英璋, 徐伟, 李宗惠. 第八次全国色谱学术报告会文集, 1991; 116
27 张平夫, 漆佳丽, 李明炬. 第九次全国色谱学术报告会文集, 1993: 478
28 龚道新, 杨仁斌, 郭正元等. 色谱, 1996; 14: 481
29 林润国. 第八次全国色谱学术报告会文集, 1991: 139
30 GB 9552—88. 中国国家标准汇编, 1992; 115: 283
31 Mangani F, Bruner F. J Chromatogr, 1984; 289: 85
32 Tekel J, Schultzova K, Farkas P, et al. HRC, 1991; 14: 423
33 SGE. Capillary Column and Application Reference, Manual Ⅱ: 56
34 Shimadzu. Application News, C180-0017
35 Shimadzu. Application News, C180-0047
36 林润国. 色谱, 1993; 11: 111

（李浩春　李全洪）

第三十二章　环境物质色谱图

第一节　大气污物色谱图

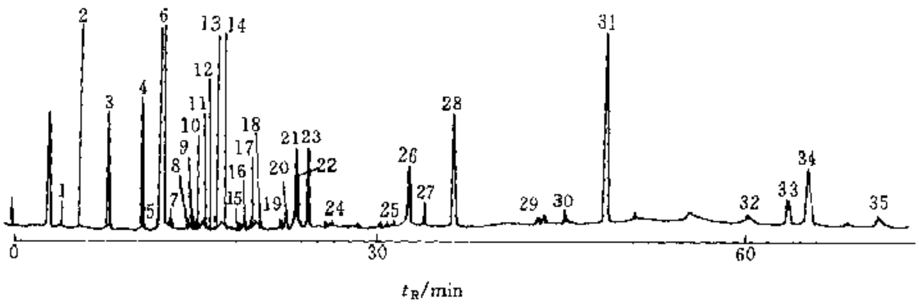
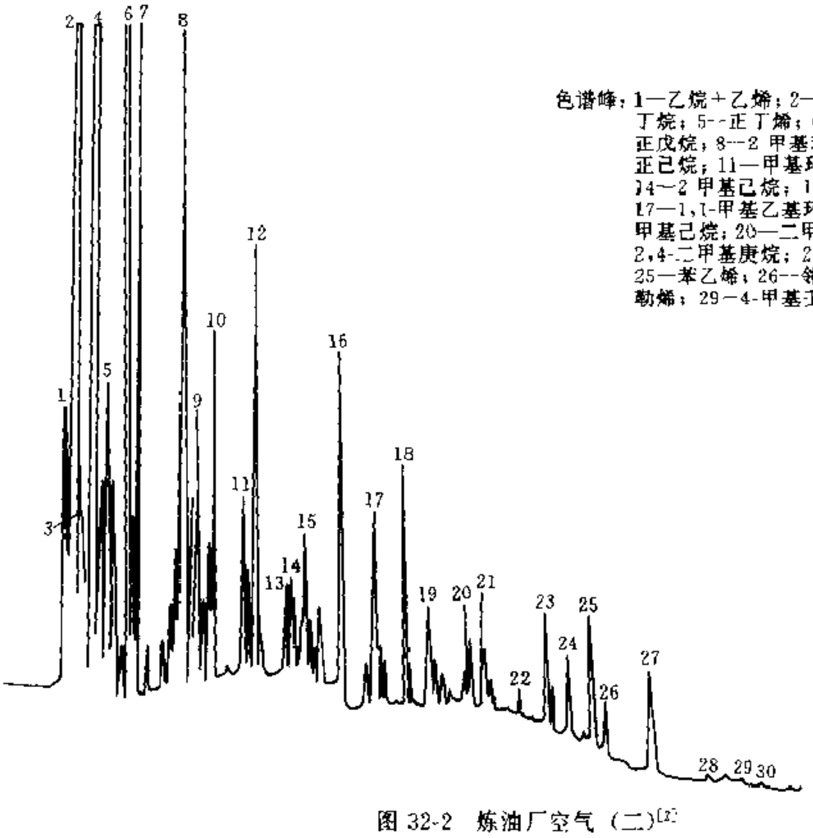


图 32-1　炼油厂空气（一）[1]

色谱峰：1—乙烷；2—乙烯；3—丙烷；4—丙烯；5—乙炔；6—甲基丙烷；7—正丁烷；8—反-2-丁烯；9—1-丁烯；10—2-甲基-1-丙烯；11—顺-2-丁烯；12,13—甲基丁烷；14—正戊烷；15—反-2-戊烯；16—1-戊烯；17—甲基丁烯；18—顺-2-戊烯；19—甲基环戊烷；20—环己烷；21—2-甲基戊烷；22—3-甲基戊烷；23—正己烷；24—C_6 不饱和烃；25—C_7 支键烷烃；26—2-甲基己烷+3-甲基己烷；27—正庚烷；28—苯；29—C_8 支链烷烃；30—正辛烷；31—甲苯；32—正壬烷；33—乙基苯；34—间二甲苯+对二甲苯；35—邻二甲苯

色谱柱：Al_2O_3/KCl PLOT 柱，50m×0.32mm　　载　气：He

柱　温：0℃→135℃，10℃·min^{-1}→205℃，2℃·min^{-1}　　检测器：FID



色谱峰：1—乙烷+乙烯；2—丙烷+丙烯；3—甲醚；4—异丁烷；5—正丁烯；6—丙酮+异戊烷+乙醚；7—正戊烷；8—2 甲基环戊烷；9—3-甲基戊烷；10—正己烷；11—甲基环戊烷；12—苯；13—环己烷；14—2 甲基己烷；15—3-甲基己烷；16—正庚烷；17—1,1-甲基乙基环戊烷；18—甲苯；19—2,5-二甲基己烷；20—二甲基环己烷；21—正辛烷；22—2,4-二甲基庚烷；23—对二甲苯；24—间二甲苯；25—苯乙烯；26—邻二甲苯；27—正壬烷；28—罗勒烯；29—4-甲基壬烷；30—三甲苯

色谱柱：角鲨烷，45m×0.25mm

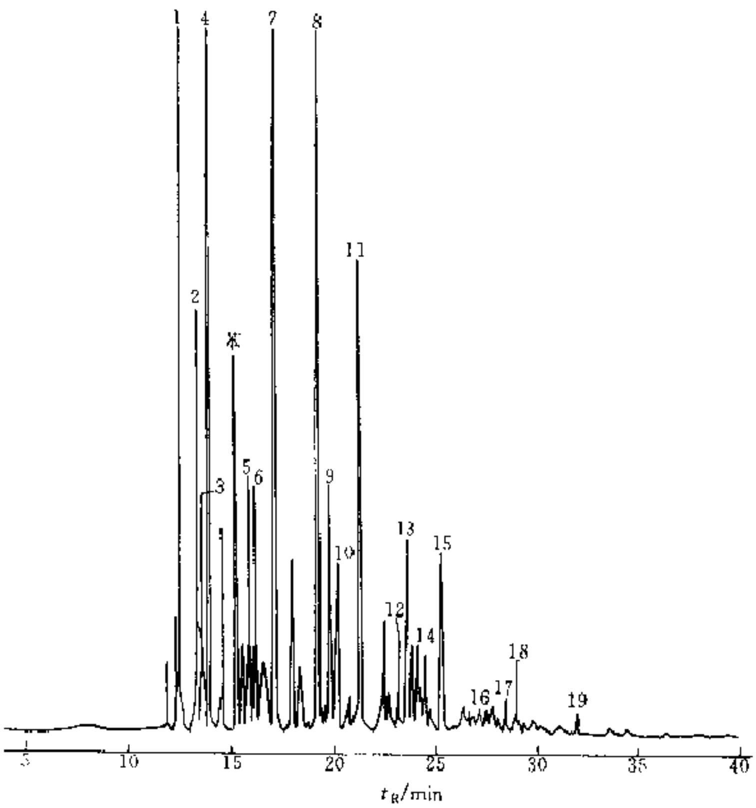
柱　温：20℃→90℃，4℃·min^{-1}

载　气：He

检测器：MS

气化室温度：120℃

图 32-2　炼油厂空气（二）[2]



色谱峰：1—4-甲基戊烯-1；2—己烯-1+2-甲基-1-戊烯；3—己烷；4—反-2-己烯；5—2-甲基己烷+2,3-二甲基戊烷；6—3-甲基己烷；7—庚烷；8—甲苯；9—2-甲基庚烷；10—3-乙基己烷；11—辛烷；12—乙基苯；13—对二甲苯+间二甲苯；14—邻二甲苯；15—壬烷；16—乙基甲苯；17—1,2,4-三甲基苯；18—癸烷；19—十一烷

色谱柱：DB-1，30m×0.53mm

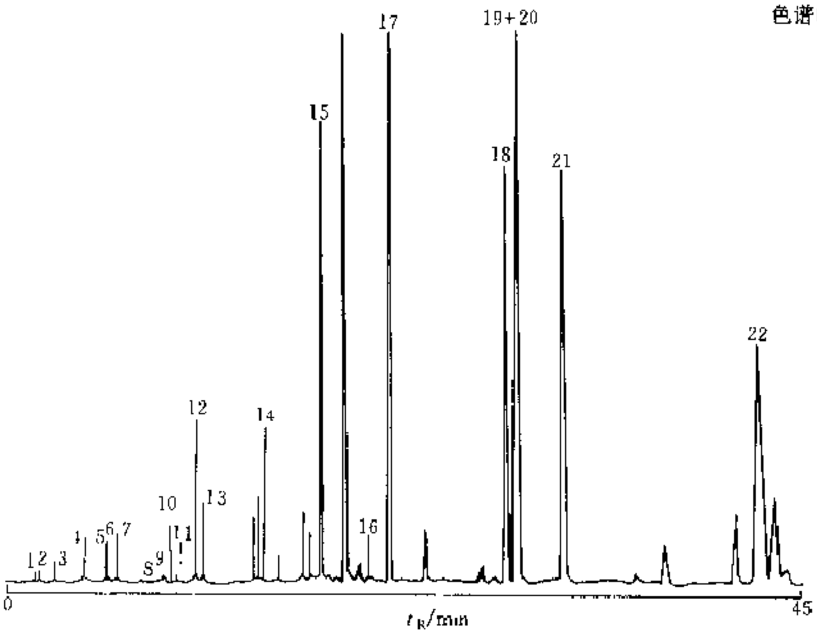
柱　温：35℃(5min)→100℃，5℃·min⁻¹→200℃，8℃·min⁻¹→250℃，5℃·min⁻¹

载　气：N_2

检测器：FID

检测器温度：270℃

图 32-3　炼油厂空气（二）[3]



色谱峰：1—乙烷；2—乙烯；3—丙烷；4—丙烯；5—乙炔；6—异丁烷；7—正丁烷；8—反-2-丁烯；9—1-丁烯；10—异丁烯；11—顺-2-丁烯；12—2-甲基丁烷；13—正戊烷；14—正己烷；15—苯；16—正辛烷；17—甲苯；18—乙基苯；19—间二甲苯；20—对二甲苯；21—邻二甲苯；22—1,2,4-三甲基苯

图 32-4　汽车废气[5]

色谱柱：Al_2O_3/KCl PLOT 柱，25m×0.32mm，d_f=0.5μm

柱　温：50℃(2min)→75℃，5℃·min^{-1}→125℃，10℃·min^{-1}→200℃(30min)，15℃·min^{-1}

载　气：He，70kPa

检测器：FID

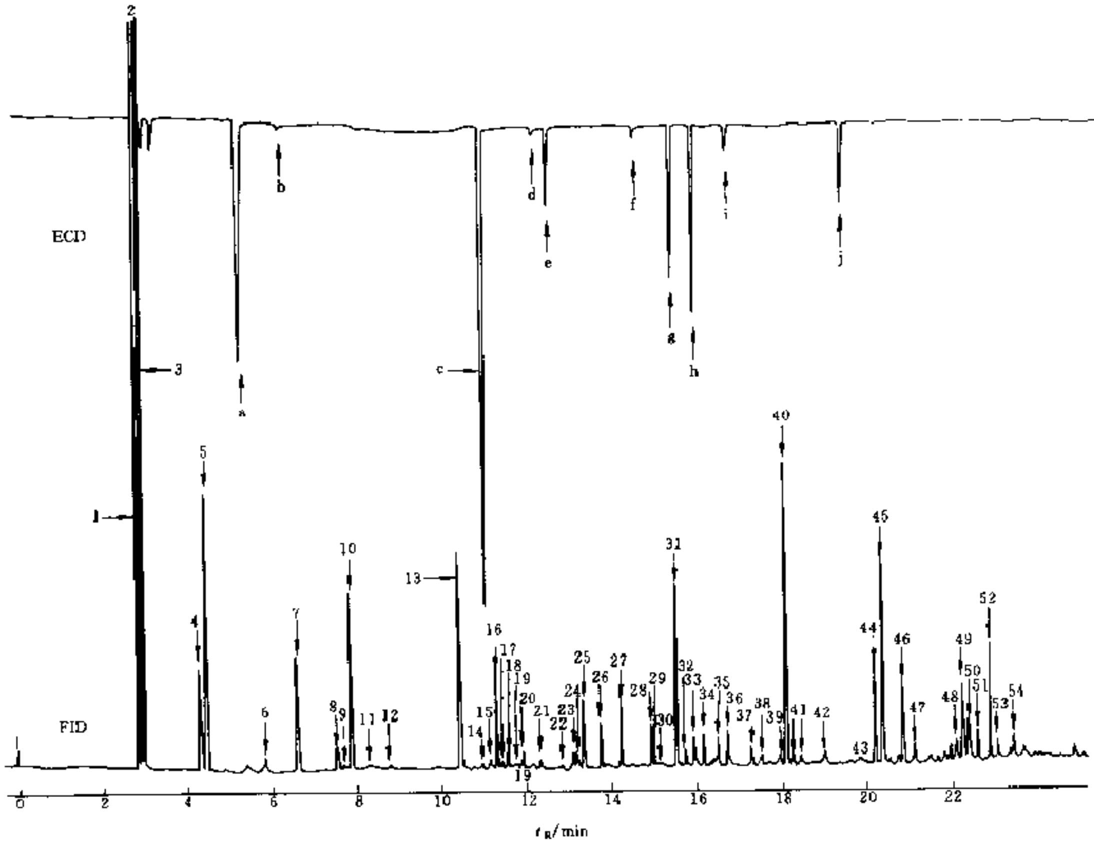


图 32-5　城市空气（一）[6]

色谱峰：1—乙烯；2—乙炔；3—乙烷；4—丙烯；5—丙烷；6—氯甲烷；7—异丁烷；8—异丁烯＋1-丁烯；9—1,3-丁二烯；10—正丁烷；11—反-2-丁烯；12—顺-2-丁烯；13—异戊烷；14—1-戊烯；15—2-甲基-1-丁烯；16—正戊烷；17—2-甲基丁二烯；18—反-2-戊烯；19—顺-2-戊烯；20—2-甲基-2-丁烯；21—2,2-二甲基丁烷；22—3-甲基-1-戊烯；23—环戊烷；24—2,3-二甲基丁烷；25—2-甲基戊烷；26—3-甲基戊烷；27—正己烷；28—甲基环戊烷；29—2,4-二甲基戊烷；30—三氯乙烷；31—苯；32—环己烷；33—2-甲基己烷；34—3-甲基己烷；35—2,2,4-三甲基戊烷；36—正庚烷；37—甲基环己烷；38—2,5-二甲基己烷；39—2,3,4-三甲基戊烷；40—甲苯；41—2-甲基庚烷；42—3-甲基庚烷；43—正辛烷；44—乙基苯；45—对二甲苯＋间二甲苯；46—邻二甲苯；47—正壬烷；48—正丙基苯；49—1,3-甲基乙基苯＋1,4-甲基乙基苯；50—1,3,5-三甲基苯；51—1,2-甲基乙基苯；52—1,2,4-三甲基苯；53—正癸烷；54—对孅花烃；a—二氯二氟乙烷；b—氯甲烷；c—二氯氟甲烷；d—二氯甲烷；e—三氯二氟乙烷；f—三氯甲烷；g—三氯乙烷；h—四氯化碳；i—三氯乙烯；j—四氯乙烯

色谱柱：甲基硅氧烷，50m×0.32mm，d_f=1.2μm

柱　温：−40℃(3min)→180℃，10℃·min⁻¹

载　气：He，105Pa→1.75×105Pa，3000Pa

检测器：FID 和 ECD

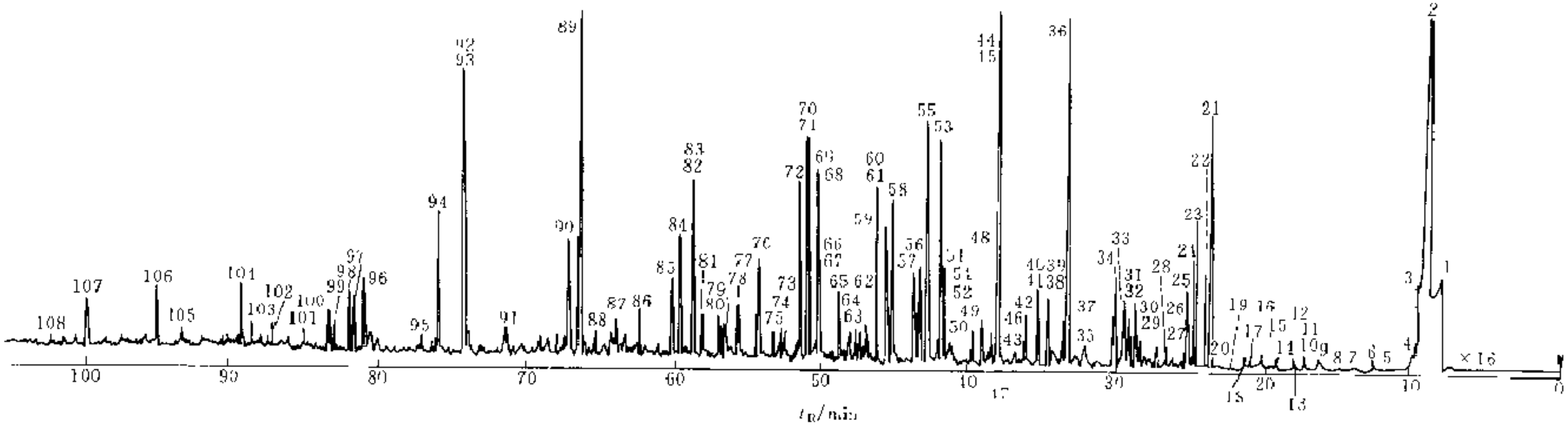


图 32-6 城市空气（二）[c]

色谱峰：1—2-甲基己烷；2—正庚烷；3—异辛烷；4—苯；5—2-甲基庚烷；6—正辛烷；7,8—异壬烷；9—正壬烷；10—甲苯；11，13～20—异癸烷；12—四氯乙烯；21—正癸烷；22—乙基苯；23—1,4-二甲基苯；24,25,28～34—异十一烷；26—1,3-二甲基苯；27—1,2-二甲基苯；35—正丙基苯；36—正十一烷；37—1-乙基-4-甲基苯；38—1-乙基-3-甲基苯；39—α-蒎烯；40—1,3,5-三甲基苯；41,43,47～49—异十二烷；42—1-乙基-2-甲基苯；44—1,2,4-三甲基苯；45—辛醛；46—1-异丙基-4-甲基苯；50—正丁基苯；51—丙基甲基苯；52—仲丁基苯；53—1,2,3-三甲基苯；54—异十三烷；55—正十二烷；56—乙基二甲基苯；57—丙基甲基苯；58—乙基二甲基苯；59—异丙基甲基苯；60—乙基二甲基苯；61—异丙基甲基苯；62—二氯苯；63,64—异十三烷；65—乙基二甲基苯；66—C_4代苯；67,73,75,80—C_5代苯；68—1,2,4,5-四甲基苯；69—苯甲醛；70—苯并呋喃；71—1,2,3,5-四甲基苯；72—正十三烷；74，77—甲基茚满；76—1,2,3,4-四甲基苯；78,79,83—异十四烷；81—4-甲基苯甲醛；82—3-甲基苯甲醛；84—正十四烷；85—苯乙酮；86—$C_{10}H_{20}O$；87—$C_{10}H_{14}O$；88—2-甲基苯甲醛；89—萘；90—正十五烷；91—二甲基苯甲醛；92—2-甲基萘；93—正十六烷；94—1-甲基萘；95—苯并噻唑；96—正十七烷；97—二甲基萘；98—联苯；99—2,6-二甲基萘；100—1,6-二甲基萘；101—1,8-二甲基萘；102—正十八烷；103—甲基联苯；104—芘；105—正十九烷；106—二苯并呋喃；107—芴；108—正廿烷

色谱柱：Ucon HB 5100，120m×0.33mm

柱　温：25℃→190℃，2℃·min⁻¹

载　气：He，8ml·min⁻¹

色谱峰：

1—二硫化碳(溶剂)；2—苯；3—甲苯；4—对二甲苯—间二甲苯；5—邻二甲苯；6—苯乙烯

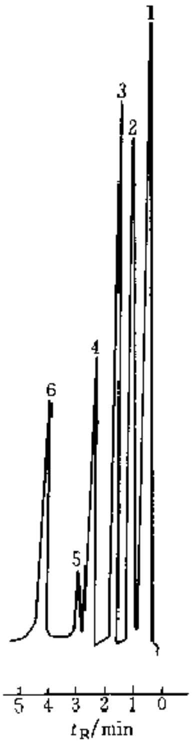


图 32-7 大气中二甲苯[?]

色谱柱：5% Carbowax 6000，6201 担体(60 目～80 目)，2m×4mm
柱 温：90℃
载 气：N_2，50ml·min⁻¹ 气化室温度：150℃
检测器：FID 检测器温度：150℃

色谱峰：

1—正庚烷；2—庚烯；3—甲醇；4—苯；5—未知物；6—甲苯；7—乙基苯；8—对二甲苯；9—间二甲苯；10—异丙基苯；11—邻二甲苯

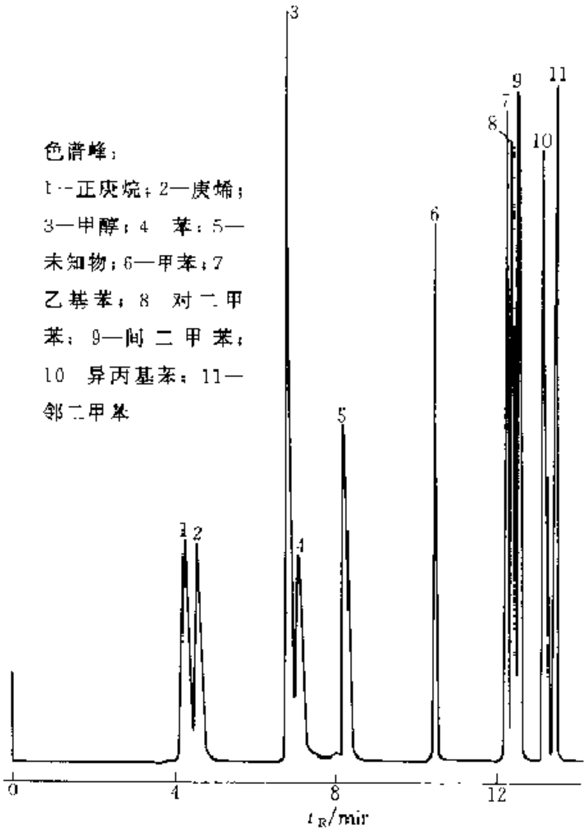
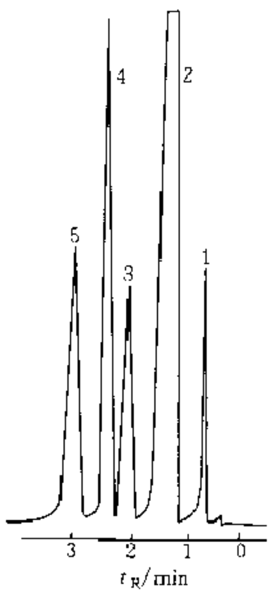


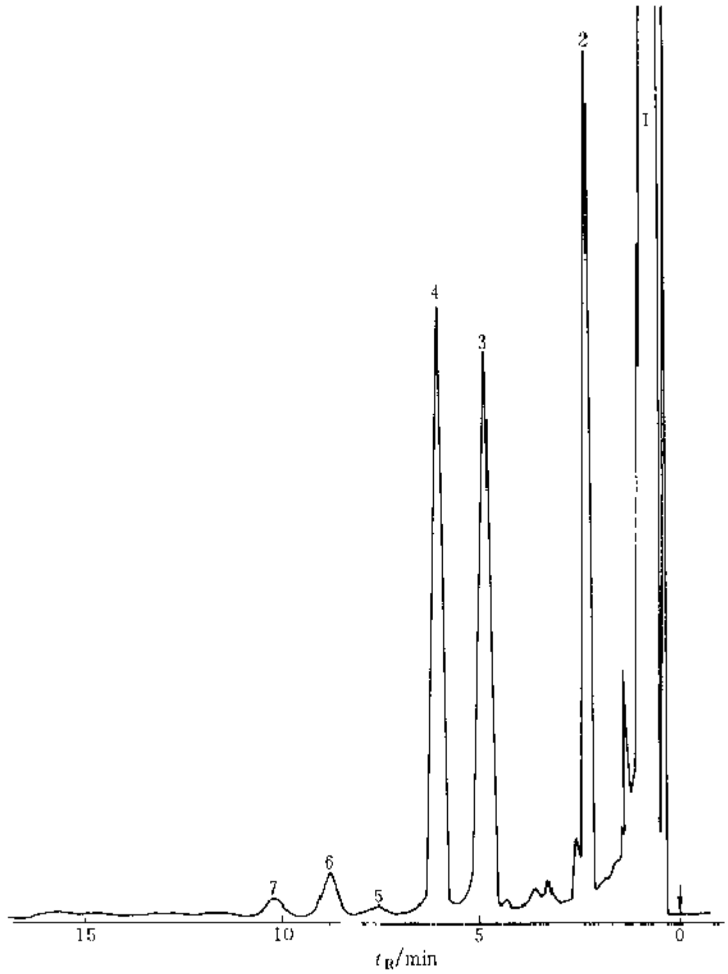
图 32-8 空气中挥发性烃——US EPA 方法 TO-1[8]

色谱柱：Supelcowax 10，60m×0.75mm，d_f=1.0μm
柱 温：35℃(1min)→220℃，8℃·min⁻¹
载 气：He，40ml·min⁻¹ 检测器：FID



色谱峰：1—甲醇；2—乙醇；3—丙酮；4—丙烯腈；5—正丙醇
色谱柱：GDX-102(60 目～80 目)，2m×3mm
柱 温：150℃
载 气：N_2，55ml·min⁻¹
检测器：FID
气化室温度：180℃
检测器温度：180℃

图 32-9 大气中丙酮[10]



色谱峰：1—溶剂；2—茚；3—正十六烷(内标物)；4—萘；5—硫茚；6—β-甲基萘；7—α-甲基萘

色谱柱：6.5% 丁二酸乙二醇聚酯、201 酸洗担体(60目~80目)，2m×3mm

柱　温：130℃

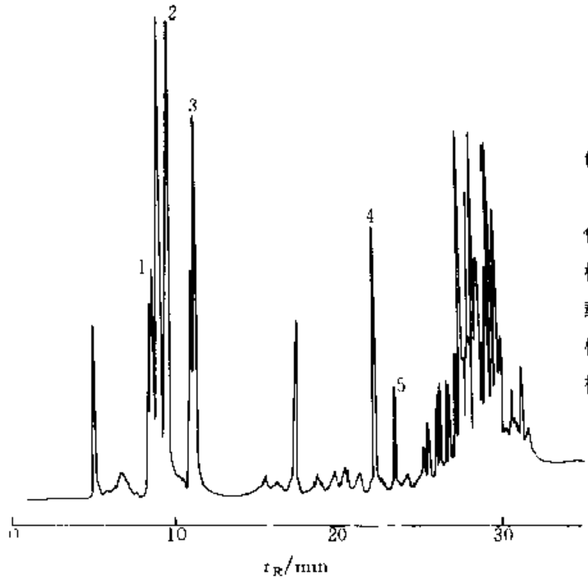
载　气：N_2，35ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：140℃

图 32-10　城市燃气中萘[9]



色谱峰：1—乙醇；2—丙酮；3—2-甲基丁二烯；4—甲基异丁基酮；5—甲苯

色谱柱：RSL 160，25m×0.32mm，d_f=5μm

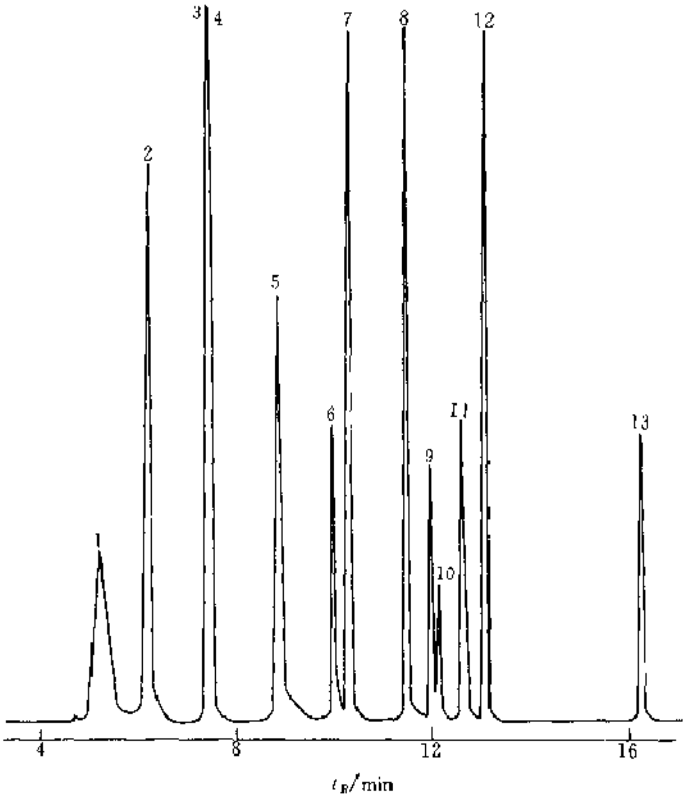
柱　温：40℃(5min)→200℃，10℃·min^{-1}

载　气：He，1ml·min^{-1}

检测器：FID

检测器温度：250℃

图 32-11　幼儿居室中空气[11]



色谱峰：

1—氯乙烯；2—1,1-二氯乙烯；3—四氯化碳；4—1,1,1-三氯乙烷；5—3-氯丙烯；6—二氯甲烷；7—苯；8—丙烯腈；9—氯仿；10—四氯乙烯；11—甲苯；12—1,2-二氯乙烷；13—氯苯

图 32-12 空气中挥发物——US EPA 方法 TO-2 与 TO-3[8]

色谱柱：Supelcowax 10，60m×0.75mm，d_f=1.0μm　　载　气：He，8ml·min^{-1}

柱　温：35℃(4min)→160℃，8℃·min　　检测器：FID

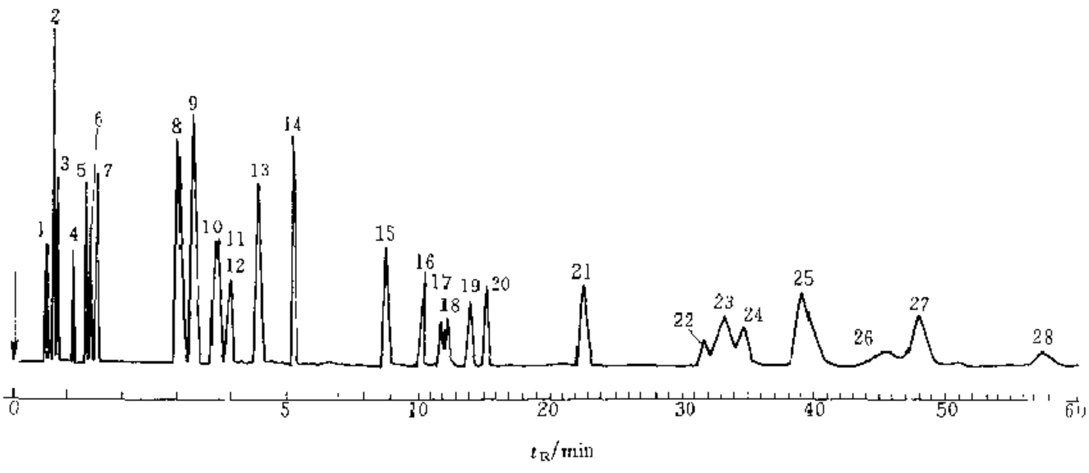


图 32-13 空气中烃与腈类[12]

色谱峰：1—甲烷；2—乙烯+乙炔；3—乙烷；4—氰；5—丙烯+氢氰酸；6—丙烷；7—丙二烯+丙炔；8—异丁烷；9—1-丁烯+异丁烯；10—丁烷；11—反-2-丁烯+1-丁炔；12—顺-2-丁烯；13—丙炔腈；14—乙腈；15—丙烯腈；16—1-戊烯；17—正戊烷；18—2-甲基-2-丁烯；19—环丙烷；20—丙腈；21—甲丙烯腈；22—异丁腈+3-甲基丙烷+1-己烯；23—氯基丙炔+顺或反巴豆腈；24—正己烷；25—3-丁烯腈；26—苯+丁腈+反-或顺-巴豆腈；27—环己烷+环己烯；28—环戊烷腈

色谱柱：PoraPLOTQ，10m×0.32mm　　载　气：H_2，2ml·min^{-1}

柱　温：100℃　　检测器：FID

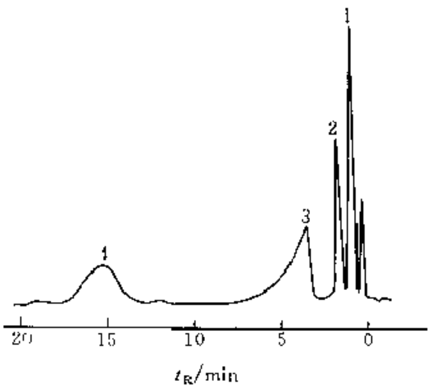


图 32-14 空气中微量硫化物[13]

色谱峰：1—H_2S；2—SO_2；3—CH_3SH；4—CH_3SCH_3

色谱柱：0.3% Dexsil 300—0.5% H_3PO_4，石墨化炭黑（40 目～60 目），1.25m×3mm

柱 温：40℃

载 气：N_2，100ml·min^{-1}

检测器：PFD

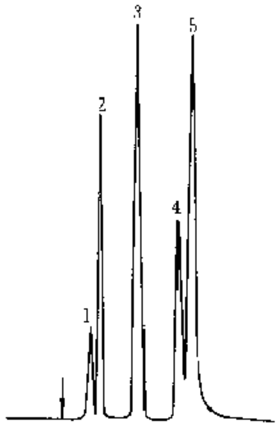


图 32-15 大气中二硫化碳[14]

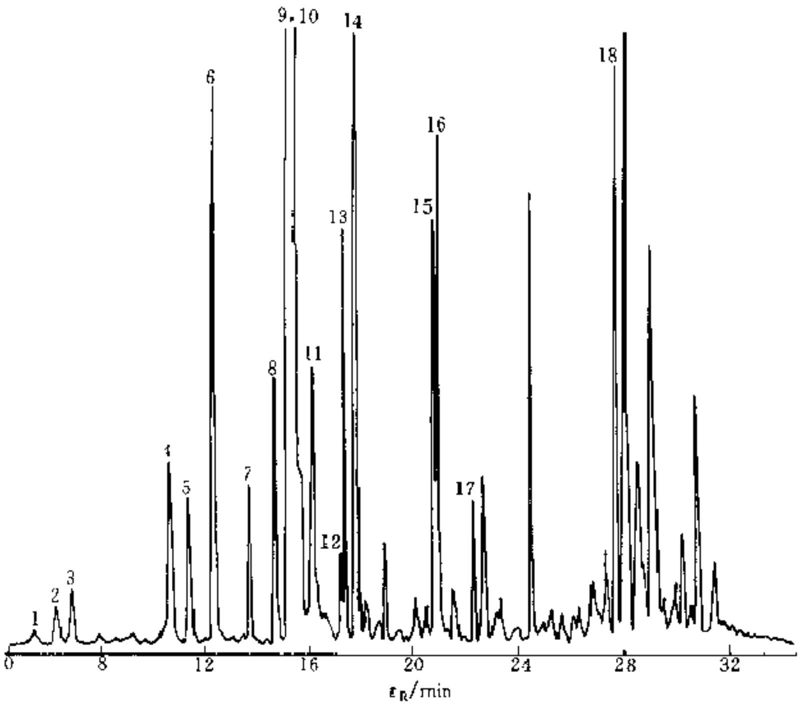
色谱峰：1—空气；2—硫化氢；3—二氧化硫；4—甲硫醚；5—二硫化碳

色谱柱：25% 磷酸三甲苯酯，Chromosorb P（60 目～80 目），1.5m×4mm

柱 温：75℃ 载 气：N_2，18ml·min^{-1}

检测器：FPD 气化室温度：120℃

检测器温度：120℃



色谱峰：1—2-甲基丁烷；2—三氯一氟甲烷；3—戊烷；4—2-甲基戊烷；5—3-甲基戊烷；6—已烷；7—甲基环戊烷；8—一溴一氯甲烷（内标物）；9—1,1,1-三氯乙烷；10—四氯化碳；11—苯；12—庚烷；13—1,4-二氟苯（内标物）；14—三氯乙烯；15—甲苯-d_8；16—甲苯；17—四氯乙烯；18—4-溴氟苯

色谱柱：DB-624，30m×0.53，d_f=3.0μm

柱 温：10℃（5min）→180℃（10min），5℃·min^{-1}

载 气：He，7ml·min^{-1}

检测器：MS

图 32-16 室内空气——US EPA 方法 TO-1[15]

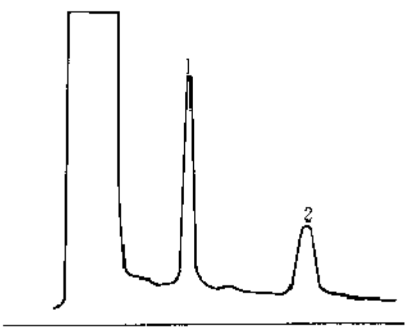


图 32-17 大气中苯乙烯(溴化处理)[16]

色谱峰：1 四溴乙烷(内标)；2—二溴化苯乙烯

色谱柱：3% OV 17,Chromosorb W HP(80目～100目),1m×2mm

柱 温：130℃

载 气：N_2，30ml·min⁻¹

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：300℃

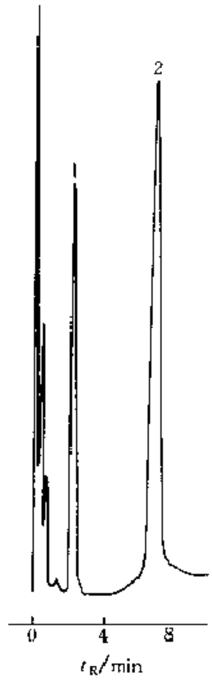


图 32-18 空气中微量铍和铝（三氟乙酰丙酮酸衍生物）[17]

色谱峰：1—铍；2—铝

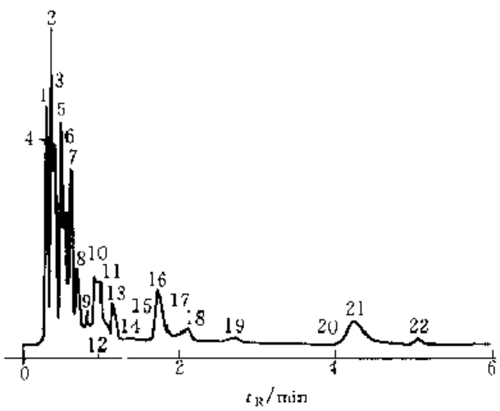
色谱柱：2.8% W-98 硅磺油，硅藻土9，2m×3mm

柱 温：110℃

载 气：90% Ar—10% CH_4，54.2ml·min⁻¹

检测器：ECD

第二节 水质污物色谱图



色谱峰：1—异戊烷；2—未知物；3—正戊烷；4—2,2-二甲基丁烷；5—2-甲基戊烷；6—3-甲基戊烷；7—正己烷；8—2,4-二甲基戊烷；9—苯；10—环己烷；11—2,3-二甲基戊烷；12—3-甲基己烷；13—2,2,4-三甲基戊烷；14—正己烷；15—2,5-二甲基己烷+2,4-二甲基己烷；16—甲苯；17—3-甲基庚烷；18—四甲基环戊烷；19—正庚烷；20—对二甲苯；21—邻二甲苯；22—间二甲苯

色谱柱：SE-30，Gas Chrom Q (80目～100目)；3m×6mm

柱 温：25℃ 载 气：He，110ml·min⁻¹

检测器：FID 气化室温度：200℃

检测器温度：275℃

图 32-19 水中汽油[18]

色谱峰：1—苯；2—甲苯；3—乙苯；4—对二甲苯；5—间二甲苯；6—邻二甲苯；7—异丙苯；8—苯乙烯
色谱柱：将3%有机皂土和2.5%邻苯二甲酸二壬酯分别涂渍在上试101担体(60目~80目)，并先后填装入柱中，成为质量比为35：65的串联柱，3m×4mm
柱　温：65℃
载　气：N_2，34ml·min^{-1}
检测器：FID
气化室温度：200℃
检测器温度：150℃

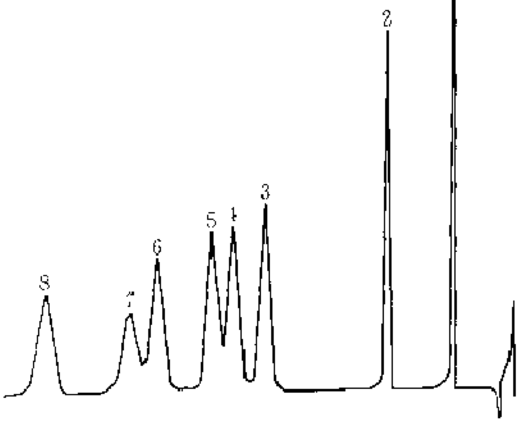


图 32-20　水中低沸点芳烃[19]

色谱峰：
1—苯；2—甲苯；3—乙苯；4—对二甲苯；5—间二甲苯；6—邻二甲苯；7—苯乙烯

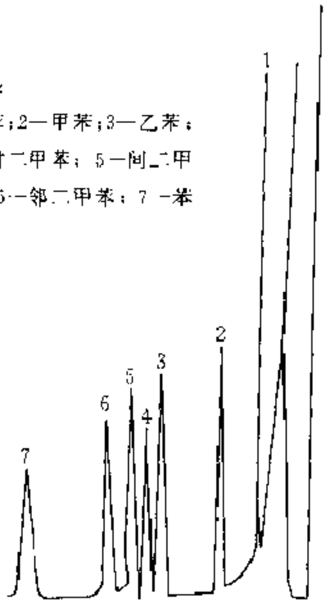


图 32-21　水源水中低沸点芳烃[20]

色谱柱：3.5%有机皂土+2.5%邻苯二甲酸二壬酯，上试101担体(60目~80目)，3m×2.5mm
柱　温：70℃　　气化室温度：250℃　　检测器：FID
载　气：N_2　　检测器温度：160℃

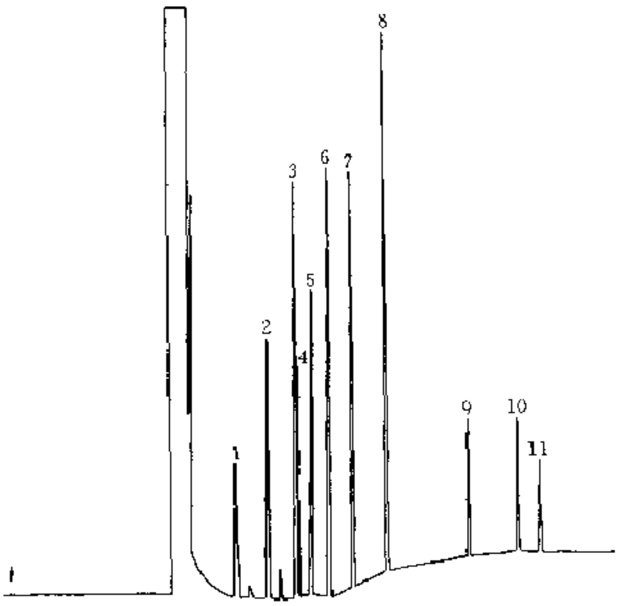


图 32-22　水中芳烃[21]

色谱峰：1—苯；2—甲苯；3—对二甲苯；4—间二甲苯；5—邻二甲苯；6—苯乙烯；7—甲基苯乙烯；8—茚；9—萘；10—2-甲基萘；11—1-甲基萘
色谱柱：CP-Wax 57 CB，50m×0.32mm
柱　温：55℃→75℃，4℃·min^{-1}；→190℃，15℃·min^{-1}
载　气：H_2，4ml·min^{-1}
检测器：FID
进样方式：柱上进样

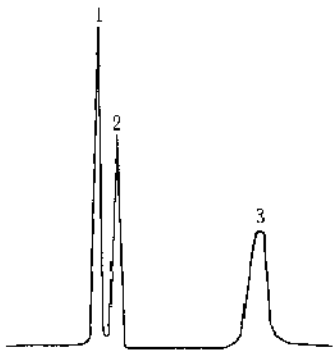


图 32-23　水中醇

色谱峰：1—甲醇；2—乙醇；3—水
色谱柱：10% PEG 1000，聚四氟乙烯担体；2.25m×4mm
柱　温：60℃
载　气：H_2，62ml·min^{-1}
检测器：TCD

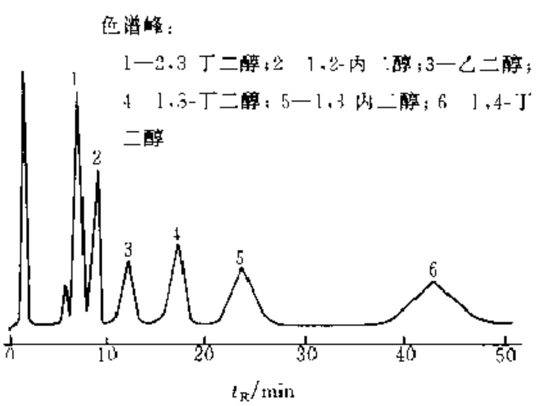


图 32-24 水中二元醇（一）[2[illegible]]

色谱柱：10% 四(双羟乙基)亚乙基二胺，Chromosorb W(60 目～80 目)；1m×6mm

柱 温：150℃　　检测器：FID

气化室温度：180℃　检测器温度：220℃

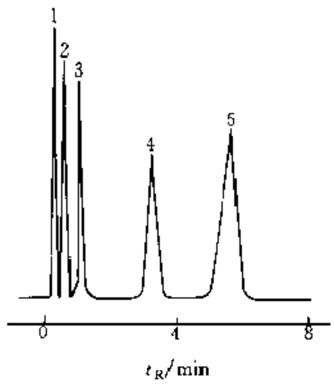


图 32-25 水中二元醇（二）[21]

色谱峰：1—水；2—环氧乙烷；3—环氧丙烷；4—乙二醇；5—丙二醇

色谱柱：Porapak Q(60 目～80 目)，2m×4.7mm

柱 温：158℃

载 气：H_2，60ml·min^{-1}

检测器：TCD

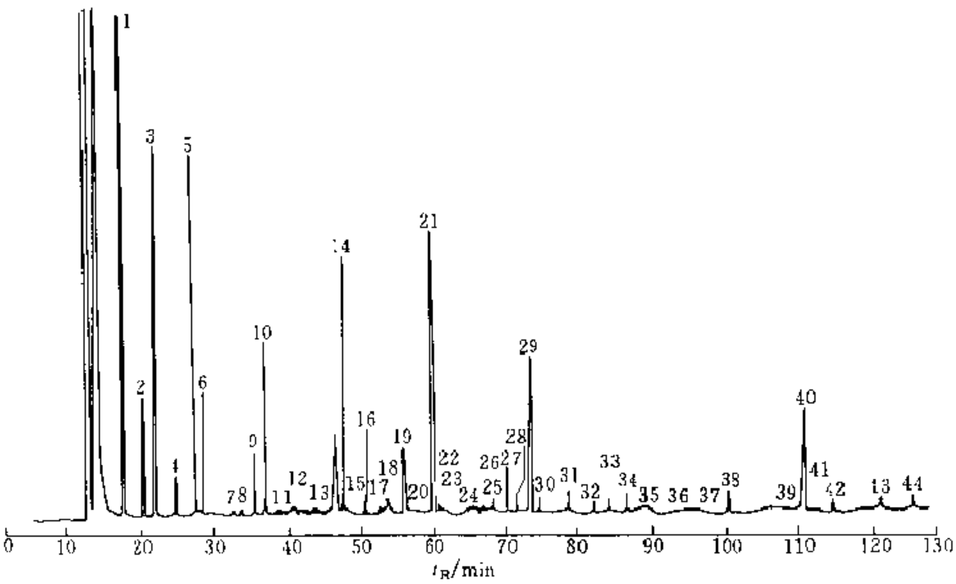
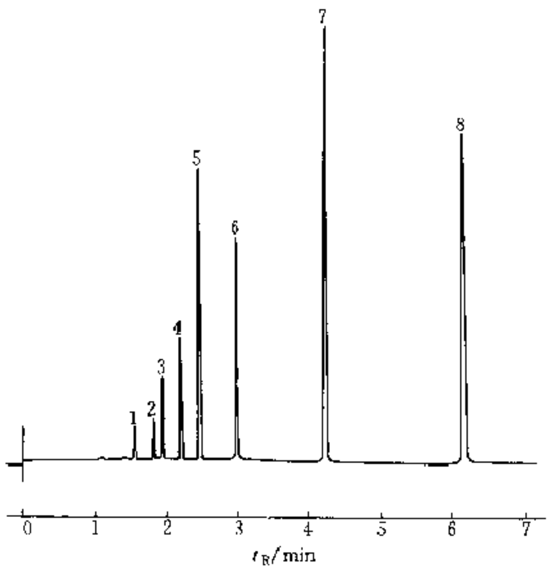


图 32-26 煤气化废水中有机酸(甲酯衍生物)[27]

色谱峰：1—正丙酸甲酯；2—异丁酸甲酯；3—正丁酸甲酯；4—异戊酸甲酯；5—正戊酸甲酯；6—草酸二甲酯；7—2-甲基硫环丙烷；8—异己酸甲酯；9—丙二酸二甲酯；10—正己酸甲酯；11—丁二酸二甲酯；12—4-甲基戊酸甲酯；13—4-乙基戊酸甲酯；14—正庚酸甲酯；15—5-酮己酸甲酯；16—2-甲基丁二酸二甲酯；17—异辛酸甲酯；18—苯甲酸甲酯；19—8-烯-1-癸醇；20—5-烯辛酸甲酯；21—正辛酸甲酯；22—4-乙氧基戊酸甲酯；23—4,7-二烯壬酸甲酯；24—1,5-二烯壬酸甲酯；25—3-氧代辛酸甲酯；26—邻甲基苯甲酸甲酯；27—间甲基苯甲酸甲酯；28—对甲基苯甲酸甲酯；29—正壬酸甲酯；30—2,6-二甲基辛酸甲酯；31—3-乙基-4-烯辛酸甲酯；32—2-甲酰基苯甲酸甲酯；33—4-甲酰基苯甲酸甲酯；34—异癸酸甲酯；35—正癸酸甲酯；36—α-氰基肉桂酸甲酯；37—2,4,5-三甲基苯甲酸甲酯；38—正十一酸甲酯；39—苯酰胺基醋酸甲酯；40—卡尼精；41—正十二酸甲酯；42—7-甲氧基香豆素；43—2-羟基-辛二酸二甲酯；44—未知物

色谱柱：DB-5，25m×0.31mm　　检测器：FID

柱 温：60℃(3min)→230℃，4℃·min^{-1}



色谱峰：1—乙酸；2—丙酸；3—异丁酸；4—正丁酸；5—未知物；6—正戊酸；7—正己酸；8—正庚酸

色谱柱：BP21，25m×0.22mm，d_f=0.25μm

柱　温：140℃

检测器：FID

图 32-27　水中游离酸[46]

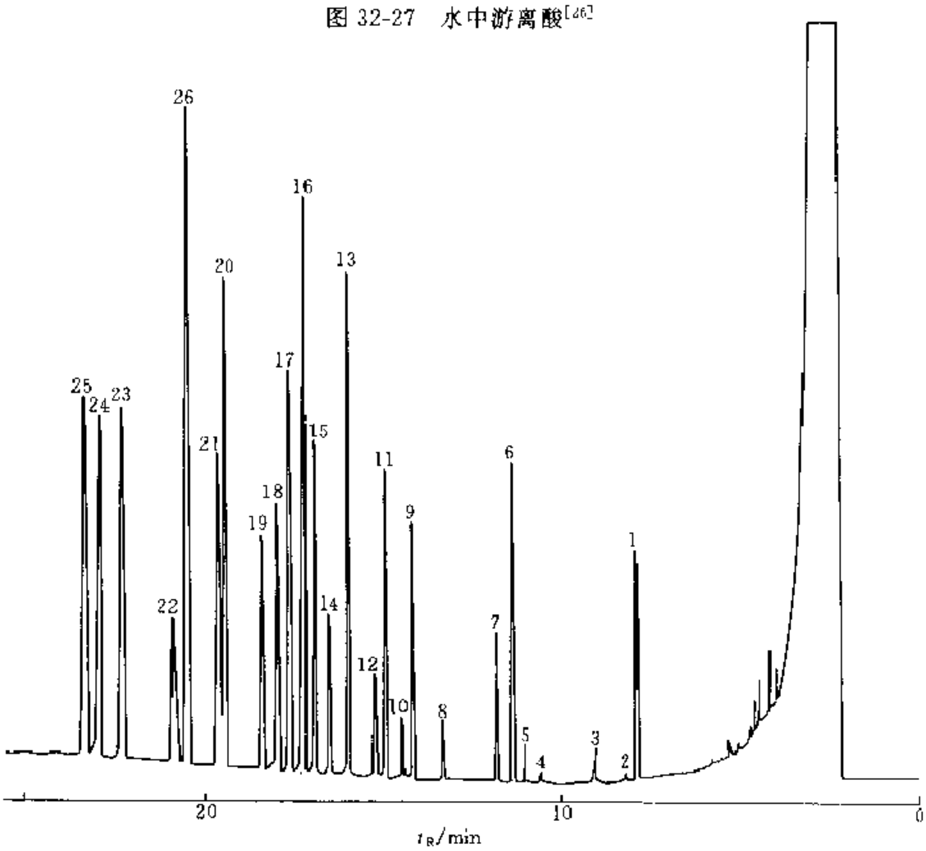


图 32-28　水中酚[47]

色谱峰：1—2,6-二甲基酚；2—苯酚；3—2-甲基酚；4—4-甲基酚；5—3-甲基酚；6—2,6-二叔丁基酚；7—2-乙基酚；8—2,3-二甲基酚；9—2-异丙基酚；10—3-乙基酚；11—2-正丙基酚；12—3,4-二甲基酚；13—2,3,5,6-四甲基酚；14—4-异丙基酚；15—2,3,5-三甲基酚；16—2-仲丁基酚；17—2-叔丁基酚；18—4-正丙基酚；19—3-正丙基酚；20—2-正丁基酚；21—4-叔丁基酚；22—3,4,5-三甲基酚；23—3,4-二乙基酚；24—4-正丁基酚；25—3-正丁基酚；26—正十八烷(内标)

色谱柱：磷酸三(2，4-二甲苯酯)，50m×0.25mm

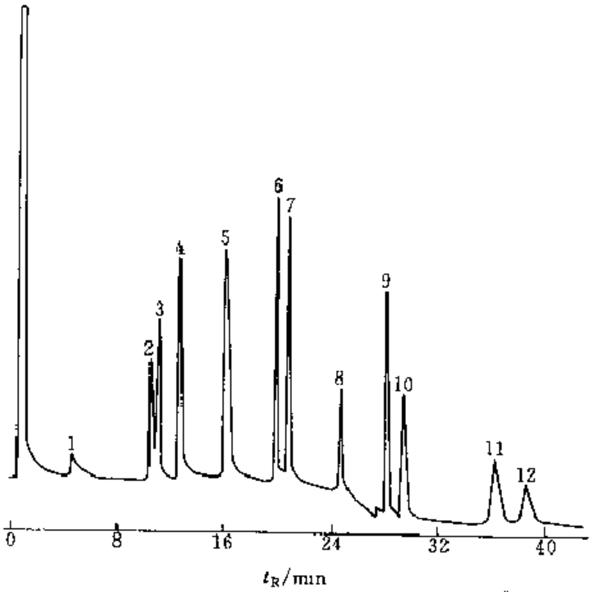
柱　温：110℃→150℃，1.5℃·min^{-1}

载　气：H_2

检测器：FID

气化室温度：175℃

检测器温度：175℃



色谱峰：1—萘；2—苊烯；3—苊；4—芴；5—菲+蒽；6—荧蒽；7—芘；8—䓛；9—苯并[b]荧蒽+苯并[k]荧蒽；10—苯并[a]芘；11—茚并[1,2,3-cd]芘+二苯并[a,h]蒽；12—苯并[ghi]苝

色谱柱：3% OV-17，Chromosorb W AW-DCMS（100目～120目），1.8m×2mm

柱　温：100℃(4min)→280℃，8℃·min^{-1}

载　气：N_2，40ml·min^{-1}

图 32-29　废水中多环芳烃——US EPA 方法 610（一）[28]

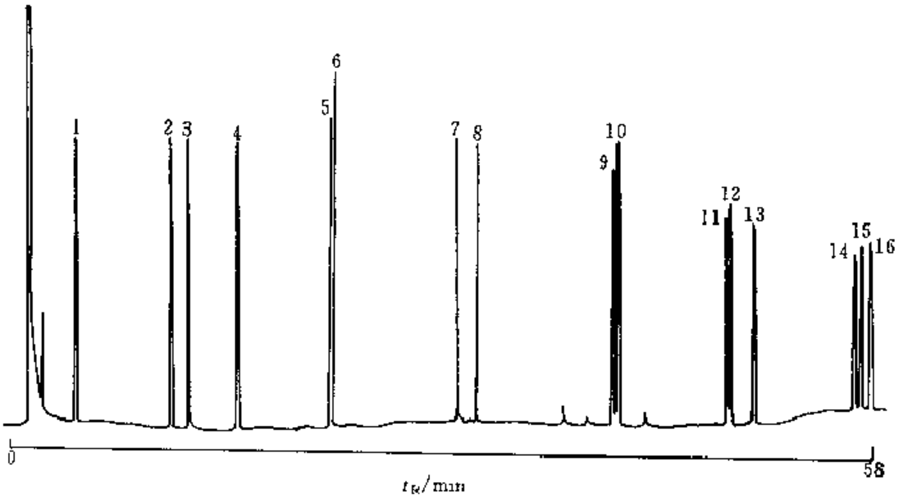


图 32-30　废水中多环芳烃——US EPA 方法（二）610

色谱峰：1—萘；2—苊烯；3—苊；4—芴；5—菲；6—蒽；7—荧蒽；8—芘；9—苯并[a]蒽；10—䓛；11—苯并[b]荧蒽；12—苯并[k]荧蒽；13—苯并[a]芘；14—茚并[1,2,3-cd]芘；15—二苯并[a,h]蒽；16—苯并[ghi]苝

色谱柱：CP-Sil PAH CB，25m×0.25mm，d_f=0.12μm

柱　温：70℃→300℃，3℃·min^{-1}

载　气：H_2，30cm·s^{-1}

检测器：FID

气化室温度：325℃

检测器温度：350℃

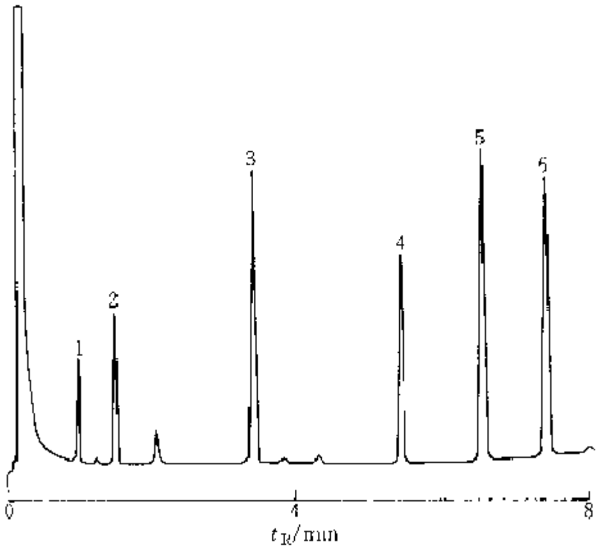


图 32-31 苯二甲酸酯——US EPA 方法 606[28]

色谱峰：1—苯二甲酸二甲酯；2—苯二甲酸二乙酯；3—苯二甲酸二正丁酯；4—苯二甲酸丁基苯酯；5—苯二甲酸双(2-乙基己基)酯；6—苯二甲酸二正辛酯

色谱柱：DB-1，15m×0.53mm，d_f=1.5μm

柱　温：150℃→275℃，15℃·min⁻¹

载　气：He

检测器：FID

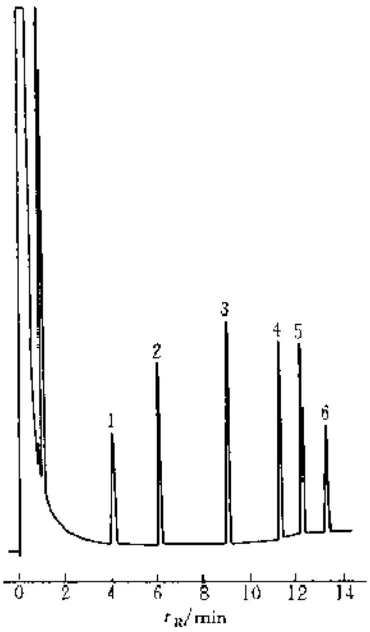


图 32-32 邻苯二甲酸酯——US EPA 方法 606[8]

色谱峰：1—邻苯二甲酸二甲酯；2—邻苯二甲酸二乙酯；3—邻苯二甲酸二正丁酯；4—邻苯二甲酸丁基苯酯；5—邻苯二甲酸双(2-乙基己基)酯；6—邻苯二甲酸二正辛酯

色谱柱：SPB-5，15m×0.53mm，d_f=1.5μm

柱　温：115℃(4min)→250℃(5min)，16℃·min^{-1}

载　气：He，30ml·min^{-1}

检测器：FID　　检测器温度：300℃

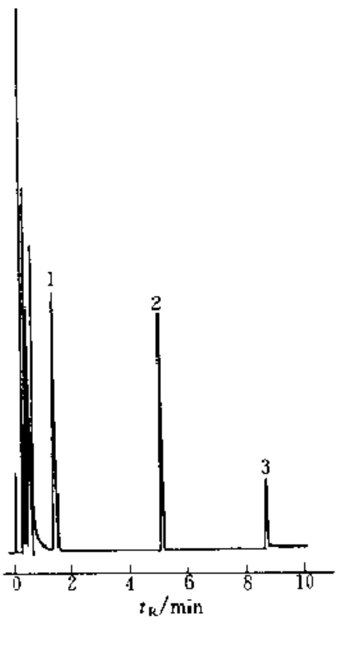


图 32-33 废水中亚硝胺——US EPA 方法 607[8]

色谱峰：1—N-亚硝基二甲胺；2—N-亚硝基二正丙胺；3—N-亚硝基二苯胺

色谱柱：SPB-5，15m×0.53mm，d_f=1.5μm

柱　温：35℃(2min)→200℃(1min)，20℃·min^{-1}

载　气：He，20ml·min^{-1}

检测器：NPD

检测器温度：250℃

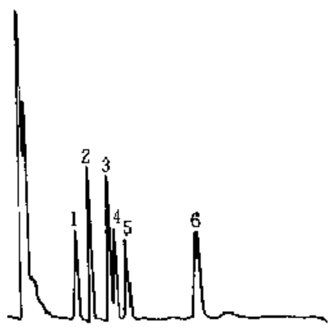


图 32-34 废水中二硝基甲苯[30]

色谱峰：1—2,6-二硝基甲苯；2—2,5-二硝基甲苯；3—2,4-二硝基甲苯；4—3,5-二硝基甲苯；5—2,5-二硝基甲苯；6—3,4-二硝基甲苯

色谱柱：Silar 10C SCOT 柱，20m×0.28mm

柱　温：160℃　　载　气：N_2

检测器：ECD　　检测器温度：275℃

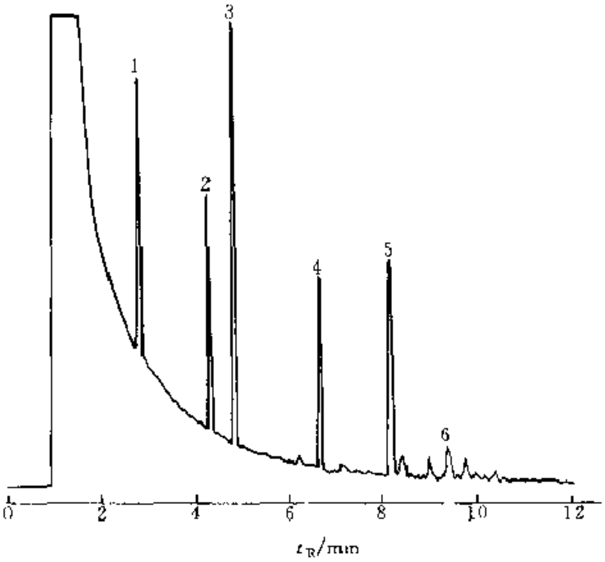


图 32-35 增塑剂[25]

色谱峰：1—邻苯二甲酸二丁酯；2—癸二酸丁二酯；3—二十二烷（内标物）；4—己二酸二(2-乙基己基)酯；5—邻苯二甲酸二(2-乙基己基)酯；6—磷酸三甲苯酯
色谱柱：DB1，30m，d_f=0.25μm
柱 温：200℃→280℃(2min)，5℃·min⁻¹
载 气：He
检测器：FID
气化室温度：280℃
检测器温度：330℃

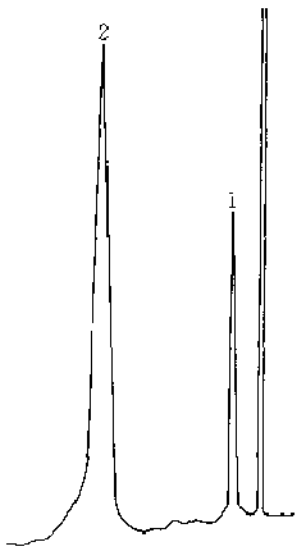


图 32-36 水源水中乙醛与丙烯醛[31]

色谱峰：1—乙醛；2—丙烯醛
色谱柱：20% Carbowax 20M，6021 釉化担体（60 目～80 目），2m×4mm
柱 温：76℃
载 气：N_2，40ml·min⁻¹
检测器：FID
气化室温度：160℃
检测器温度：150℃

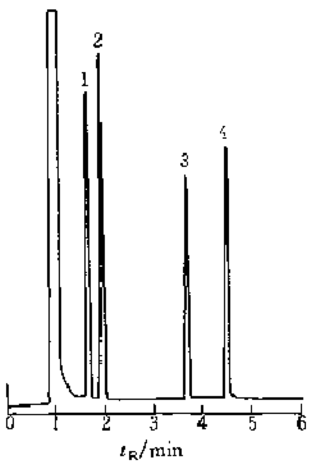


图 32-37 硝基芳烃——US EPA 方法 609[32]

色谱峰：1—硝基苯；2—异佛尔酮；3—2,6-二硝基甲苯；4—2,4-二硝基甲苯
色谱柱：DB-210，30m×0.53mm，d_f=1.0μm
柱 温：165℃→220℃，15℃·min⁻¹
载 气：He，10ml·min⁻¹
检测器：FID

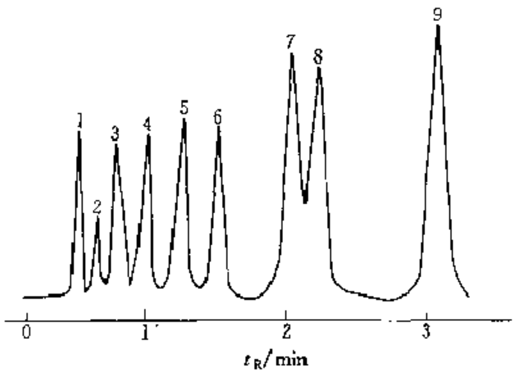


图 32-38 水中胺[33]

色谱峰：1—甲基胺；2—乙基胺；3—异丙胺；4—正丙胺；5—仲丁胺；6—正丁胺；7—异戊胺；8—正戊胺；9—正己胺
色谱柱：Chromosorb 103(100 目～120 目)，1.33m×4mm
柱 温：200℃→250℃，15℃·min⁻¹
载 气：N_2，35ml·min⁻¹
检测器：FID

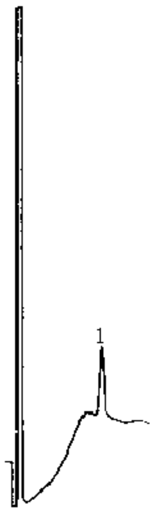


图 32-39 水中微量丙烯酰胺[36]

色谱峰：1—丙烯酰胺
色谱柱：10% PEG 6000，Shimalite (60 目～80 目)，1.5m×3mm
柱 温：160℃
载 气：He，80ml·min^{-1}
检测器：NPD
气化室温度：200℃
检测器温度：200℃



图 32-40 水源水中丙烯酰胺(溴化)[37]

色谱峰：1—2,3 二溴丙酰胺；2—乙酸乙酯(溶剂)
色谱柱：10% 丁二酸二乙二醇酯+2% 溴化钾，Chromosorb W DMCS(80 目～100 目)，2m×3mm
柱 温：170℃
载 气：N_2，100ml·min^{-1}
检测器：ECD
气化室温度：225℃
检测器温度：210℃

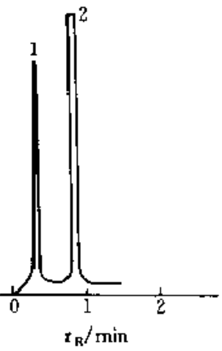


图 32-41 水中微量氯(TMCS 衍生物)[38]

色谱峰：1—TMFS；2—TMCS
色谱柱：5% OV-210，Chromosorb W AW-DMCS(60 目～80 目)，1m×3mm
柱 温：50℃
载 气：N_2，40ml·min^{-1}
检测器：FID
气化室温度：150℃
检测器温度：150℃

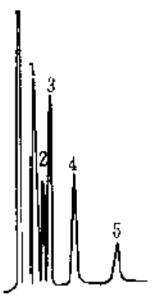


图 32-42 水中三卤代甲烷[39]

色谱峰：1—三氯甲烷；2—四氯化碳；3—溴二氯甲烷；4—二溴一氯甲烷；5—三溴甲烷
色谱柱：10% OV-101，Chromosorb W HP (80 目～100 目)，2m×3mm
柱 温：70℃
载 气：N_2，25ml·min^{-1}
检测器：ECD
气化室温度：160℃
检测器温度：160℃

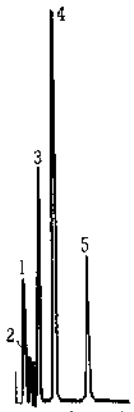


图 32-43 饮用水中三卤代甲烷——US EPA 方法 501[32]

色谱峰：1—正戊烷；2—氯仿；3—溴二氯甲烷；4—一氯二溴甲烷；5—溴仿
色谱柱：Heliflex AT-1000，10m×0.53mm，d_f=1.2μm
柱 温：100℃
载 气：N_2，3ml·min^{-1}
检测器：ECD

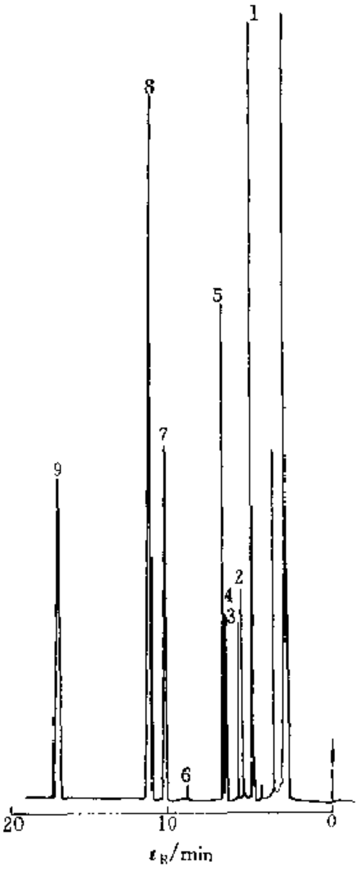


图 32-44 水中卤代烃[40]

色谱峰：1—氯仿；2—1,1,1-三氯乙烷；3—四氯化碳；4—三氯乙烯；5—二氯-溴甲烷；6—1,1,2-三氯乙烷；7—二溴一氯甲烷；8—四氯乙烯；9—溴仿

色谱柱：SE-54，50m×0.32mm

柱 温：80℃

载 气：N_2

检测器：ECD

进样方式：顶空法，80℃

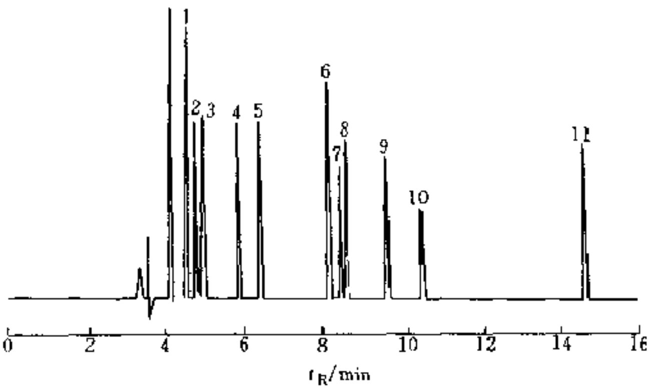


图 32-45 饮用水中卤代烃—US EPA 方法 504[15]

色谱峰：1—氯仿；2—1,1,1-三氯乙烷；3—四氯化碳；4—三氯乙烯；5—二氯一溴甲烷；6—四氯乙烯；7—二溴一氯甲烷；8—1,2-二溴乙烷；9—1,2-二溴丙烷；10—溴仿；11—1,2-二溴-3-氯丙烷

色谱柱：DB-624，30m×0.25mm，d_f=1.0μm

柱 温：40℃(0.5min)→200℃，10℃·min^{-1}

检测器：MS

气化室温度：200℃

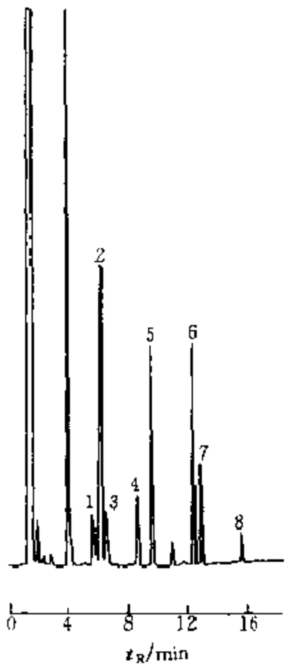


图 32-46 废水中卤代烃[42]

色谱峰：1—氯仿；2—1,1,1-三氯乙烷；3—四氯化碳；4—三氯乙烯；5—二氯一溴甲烷；6—四氯乙烯；7—一氯二溴甲烷；8—溴仿

色谱柱：DB-624，30m×0.55mm，d_f=3μm

柱 温：45℃(7min)→120℃(5min)，10℃·min^{-1}

载 气：He，6.5ml·min^{-1}

检测器：ECD

气化室温度：200℃

检测器温度：250℃

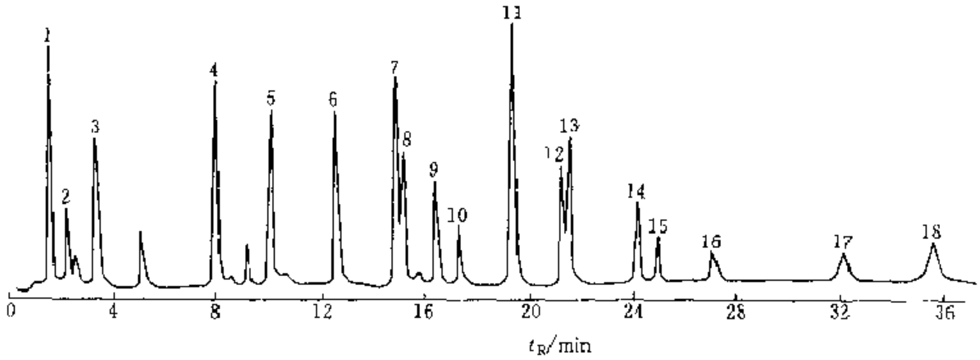


图 32-47　废水中可汽提卤代烃——US EPA 方法 601[22]

色谱峰：1—氯甲烷；2—溴甲烷；3—氯乙烷；4—1,1-二氯乙烷；5—反-1,2-二氯乙烯；6—1,1,1-三氯乙烷；7—1,2-二氯丙烷；8—反-1,3-二氯丙烯；9—顺-1,3-二氯丙烯；10—1,2-二溴乙烷；11—1,1,1,2-四氯乙烷；12—1,2,3-三氯丙烷；13—1,1,2,2-四氯乙烷；14—氯苯；15—1-氯环己烷；16—溴苯；17—2-氯甲苯；18—1,4-二氯苯

色谱柱：1% SP-1000，Carbopack(60 目～80 目)，2.43m×2.5mm

载　气：He，40ml・min^{-1}

检测器：电导检测器

柱　温：45℃(3min)→220℃(15min)，8℃・min^{-1}

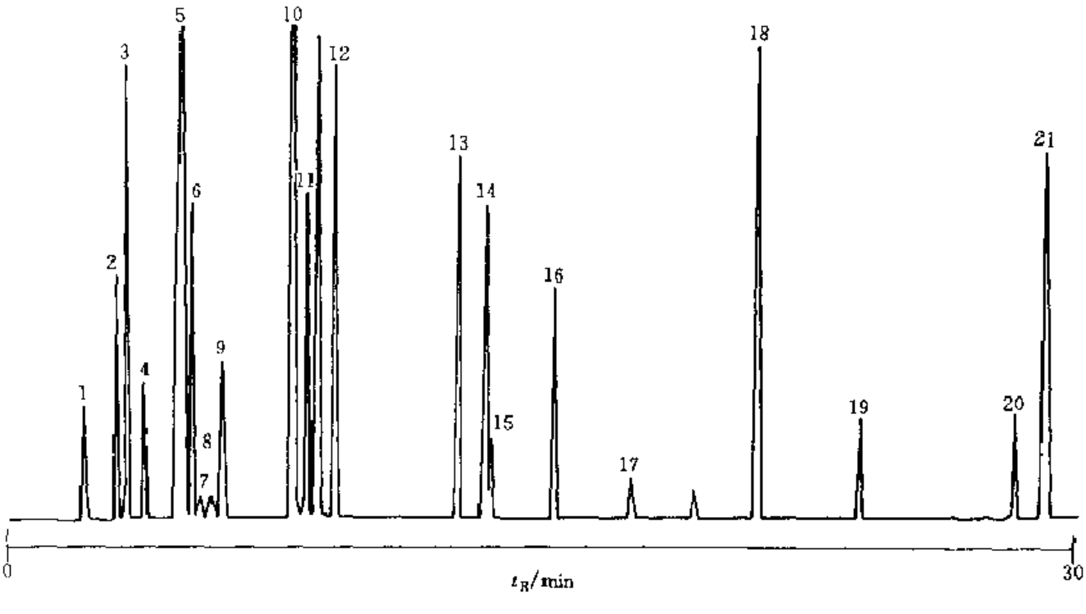


图 32-48　饮用水中可汽提卤代有机化合物——US EPA 方法 502.1[16]

色谱峰：1—三氯一氟甲烷；2—二氯甲烷；3—反-1,2-二氯乙烯；4—1,1-二氯乙烷；5—2,2-二氯丙烷＋顺-1,2-二氯乙烯；6—溴一氯甲烷；7—氯仿；8—1,1,1-三氯乙烷；9—四氯化碳；10—三氯乙烯；11—1,2-二氯丙烷；12—一溴二氯甲烷；13—1,1,2-三氯乙烷＋1,3-二氯丙烷＋四氯乙烯；14—二溴一氯甲烷；15—1,2-二溴乙烷；16—1,1,1,2-四氯乙烷；17—溴仿；18—1,2,3-三氯丙烷＋1,1,2,2-四氯乙烷；19—五氯乙烷；20—双-2-氯异丙基醚；21—1,2-二溴-3-氯丙烷

色谱柱：DB 624，30m×0.53mm，d_f=3.0μm

载　气：He，8ml・min^{-1}

柱　温：35℃(5min)→135℃，4℃・min^{-1}

检测器：ECD

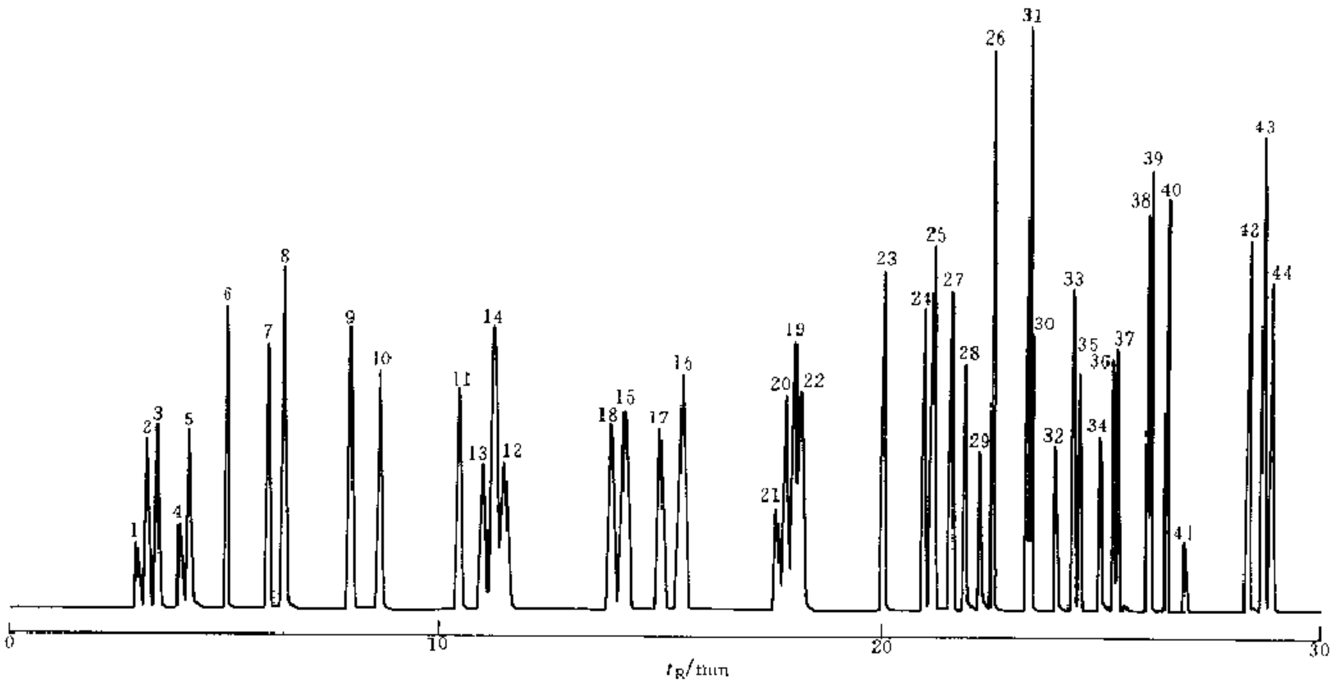


图 32-49　饮用水中可汽提卤代有机化合物——US EPA 方法 502.2[15]

色谱峰：1—二氯二氟甲烷；2—氯甲烷；3—氯乙烯；4—溴甲烷；5—氯乙烷；6—三氯一氟甲烷；7—1,1-二氯乙烯；8—二氯甲烷；9—反-1,2-二氯乙烯；10—1,1-二氯乙烷；11—顺-1,2-二氯乙烯；12—2,2-二氯丙烷；13—一溴一氯甲烷；14—氯仿；15—1,1,1-三氯乙烷；16—四氯化碳；17—1,1-二氯丙烯；18—1,2-二氯乙烷；19—三氯乙烯；20—1,2-二氯丙烷；21—二溴甲烷；22—一溴二氯甲烷；23—顺-1,3-二氯丙烯；24—反-1,3-二氯丙烯；25—1,1,2-三氯乙烷；26—四氯乙烯；27—1,3-二氯丙烷；28—二溴一氯甲烷；29—1,2-二溴乙烷；30—氯苯；31—1,1,1,2-四氯乙烷；32—溴仿；33—1,1,2,2-四氯乙烷；34—溴苯；35—1,2,3-三氯丙烷；36—2-氯甲苯；37—4-氯甲苯；38—1,3-二氯苯；39—1,4-二氯苯；40—1,2-二氯苯；41—1,2-二溴-3-氯丙烷；42—1,2,4-三氯苯；43—六氯丁二烯；44—1,2,3-三氯苯

色谱柱：DB-VRX，75m×0.45mm，d_f=2.55μm

柱　温：35℃(12min)→60℃(1min)，5℃·min^{-1}→200℃(3min)，17℃·min^{-1}

载　气：He

检测器：ELCD(反应器气体：H_2，90ml/min^{-1}；反应器温度：950℃；电解液：正丙醇，50μL/min；反应管：NiCat™)

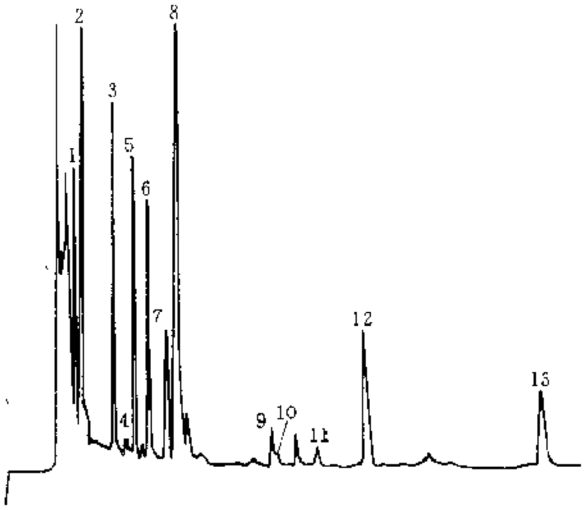


图 32-50 雨水中氯烷[12]

色谱峰：1—$CFCl_3$；2—CH_3I；3—$CHCl_3$；4—CH_2ClCH_2Cl；5—CH_3CCl_3；6—CCl_4；7—$CH_3CHClCH_2Cl$；8—$CHCl{=}CCl_2$；9—$CH_2ClCH_2CH_2Cl$；10—C_6H_5Cl；11—CH_2BrCH_2Br；12—$CCl_2{=}CCl_2$；13—$CHBr_3$

色谱柱：DBI，30m×0.32mm

柱　温：50℃

载　气：N_2

检测器：ECD

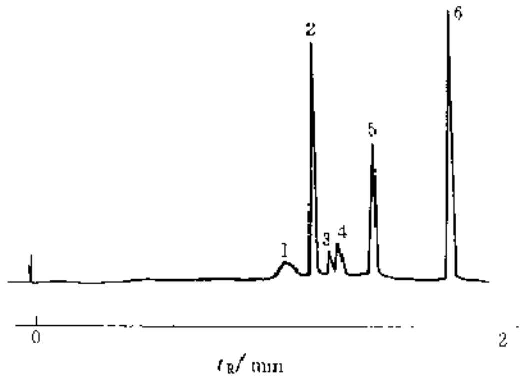


图 32-51 水中氯代烷烃[44]

色谱峰：1—水；2—二氯甲烷；3—四氯化碳；4—1,1,1-三氯乙烷；5—三氯甲烷；6—1,2-二氯乙烷

色谱柱：CP-Sil 43 CB，10m×0.10mm

柱　温：80℃

载　气：N_2

检测器：FID

色谱峰：

1—1,1,1,2-四氯乙烷；2—1,4-二氯苯；3—1,2-二氯苯；4—六氯乙烷；5—2,4-二氯甲苯；6—2,6-二氯甲苯；7—1,3,5-三氯苯；8—3,4-二氯甲苯；9—1,2,4-三氯苯；10—1,2,3-三氯苯；11—六氯-1,3-丁二烯；12—1,1,2,2-四溴乙烷(内标物)；13—1,2,3,5-四氯苯；14—1,2,3,4-四氯苯；15—五氯苯

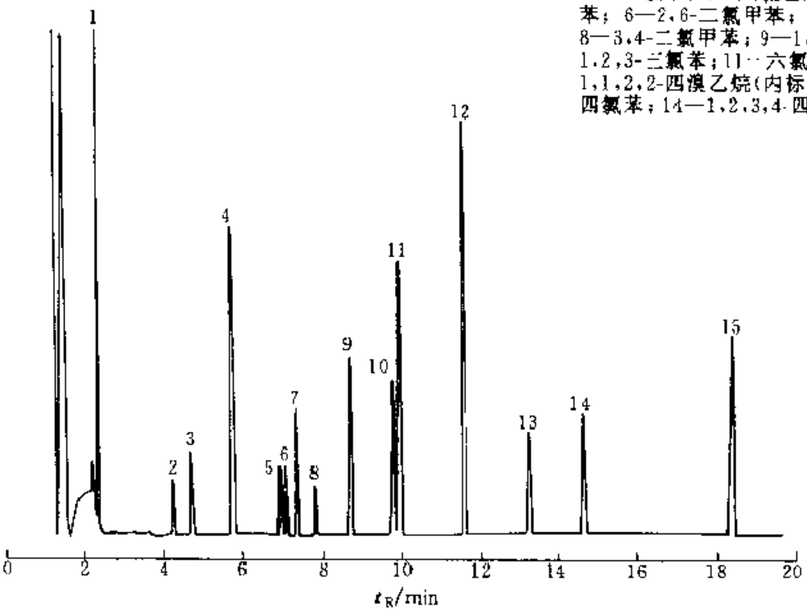


图 32-52 水中氯代烃[29]

色谱柱：DBI，30m，d_f=0.25μm

柱　温：80℃(5min)→280℃(5min)，5℃·min^{-1}

载　气：He

检测器：ECD

气化室温度：280℃

检测器温度：350℃

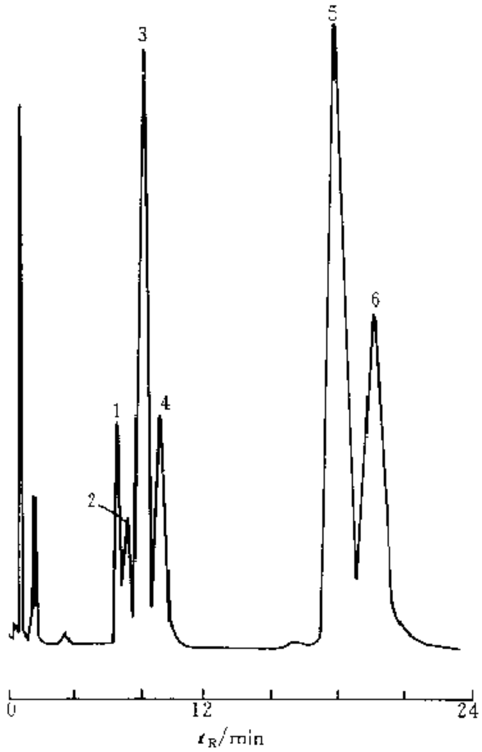


图 32-53 废水中氯代烃——US EPA 方法 612[22]

色谱峰：1—1,2-二氯苯；2—1,4-二氯苯；3—六氯乙烷；4—1,2-二氯苯；5—六氯丁二烯；6—1,2,4-三氯苯

色谱柱：1.5% OV-1+2.4% OV-225，Supelcoport(80 目～100 目)，1.8m×2mm

柱　温：75℃

载　气：5% CH_4+95% Ar，25ml·min^{-1}

检测器：ECD

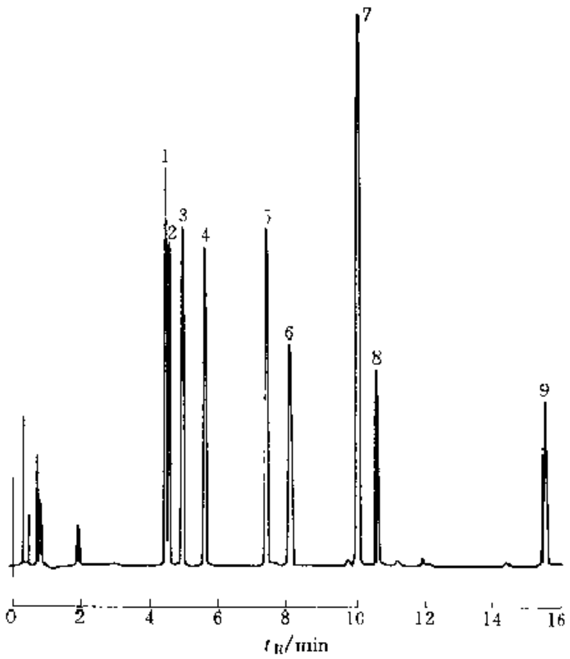


图 32-54 废水中氯代烃——US EPA 方法 612[8]

色谱峰：1—1,3-二氯苯(20ng)；2—1,4-二氯苯(20ng)；3—1,2-二氯苯(20ng)；4—六氯乙烷(0.1ng)；5—1,2,4-三氯苯(4ng)；6—六氯丁二烯(0.1ng)；7—六氯环戊二烯(0.1ng)；8—2-氯萘(40ng)；9—六氯苯(0.1ng)

色谱柱：SPB-5，15m×0.53mm，d_f=1.5μm

柱　温：50℃→175℃，8℃·min^{-1}

载　气：He，10ml·min^{-1}

检测器：ECD　　检测器温度：250℃

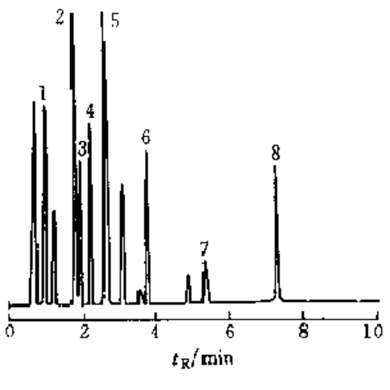


图 32-55 废水中氯代烃——US EPA 方法 612[32]

色谱峰：1—氯苯；2—六氯乙烷；3—1,3-二氯苯；4—1,2-二氯苯；5—六氯丁二烯；6—六氯环戊二烯；7—2-氯萘；8—六氯苯

色谱柱：DB-210，30m×0.53mm，d_f=1.0μm

柱　温：85℃→175℃，10℃·min^{-1}→250℃，15℃·min^{-1}

载　气：He，10ml·min^{-1}

检测器：FID

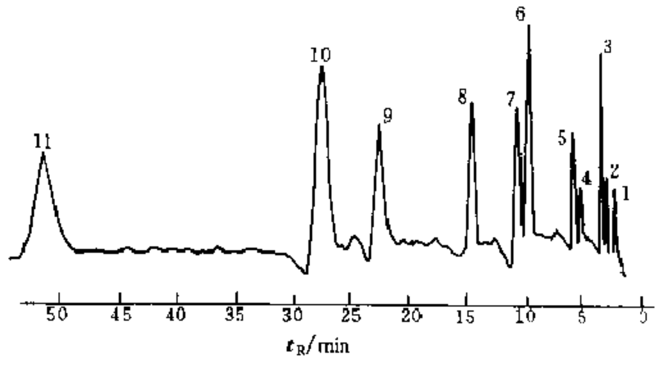


图 32-56 水中氯代苯[39]

色谱峰：1—对-二氯苯；2—间-二氯苯；3—1,3,5-三氯苯；4—邻-二氯苯；5—1,2,4-三氯苯；6—1,2,3,5-四氯苯；7—1,2,4,5-四氯苯；8—1,2,3-三氯苯；9—1,2,3,4-四氯苯；10—五氯苯；11—六氯苯

色谱柱：2% 有机皂土+2% DC-200，101 担体(80 目～100 目)

柱　温：120℃　　载　气：N_2，60ml·min^{-1}

检测器：ECD　　气化室温度：150℃

检测器温度：150℃



图 32-57 水源水中氯代苯[45]

色谱峰：1—对二氯苯；2—间二氯苯；3—1,3,5-三氯苯；4—邻二氯苯；5—1,2,4-三氯苯；6—1,2,3,5-四氯苯；7—1,2,4,5-四氯苯；8—1,2,3-三氯苯；9—1,2,3,4-四氯苯；10—五氯苯；11—六氯苯

色谱柱：2% 有机皂土+2% DC-200，上试 101 白色硅烷化担体(80 目～100 目)，2m×3mm

柱　温：120℃

载　气：N_2，50ml·min^{-1}　　气化室温度：160℃

检测器：ECD　　检测器温度：160℃

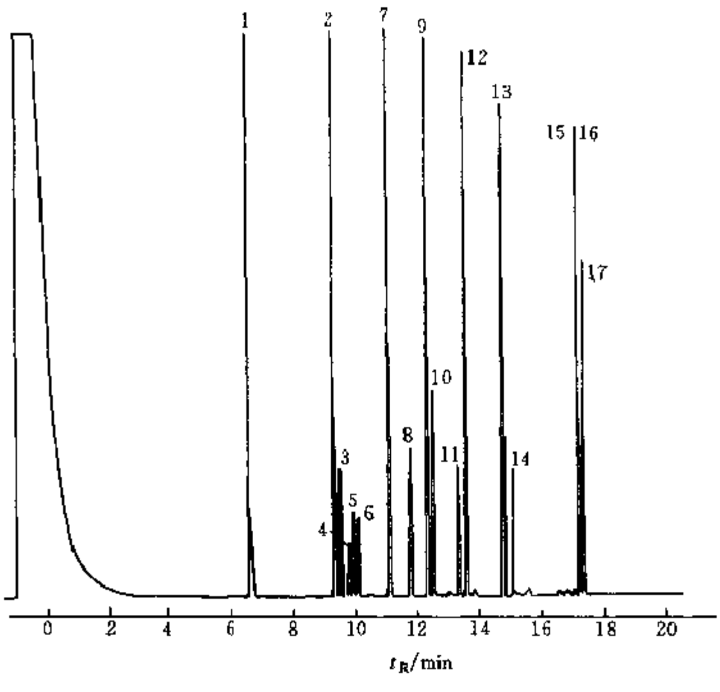


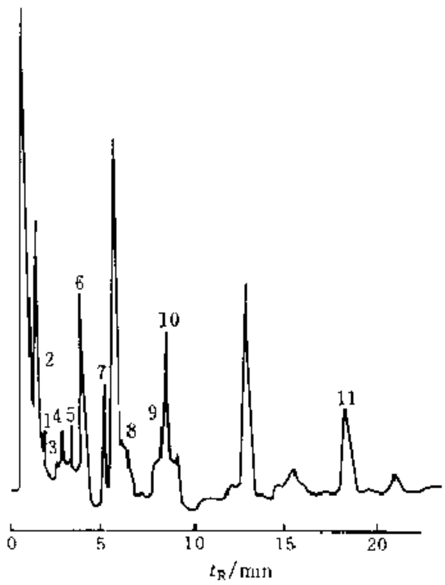
图 32-58 饮用水中多氯联苯——US EPA 方法 525[8]

色谱峰：1—2-氯联苯；2—2,3-二氯联苯；3—六氯苯；4—西玛津；5—阿特拉津；6—γ-六六六；7—2,4,5-三氯联苯；8—六氯；9—2,2′,4,4′-四氯联苯；10—艾氏剂；11—环氧七氯；12—2,2′,3′,4,6-五氯联苯；13—2,2′,4,4′,5,6′-六氯联苯；14—异狄氏剂；15—甲氧滴滴涕；16—2,2′,3,3′,4,4′,6-七氯联苯；17—2,2′,3,3′,4,5′,6,6′-八氯联苯

色谱柱：PTE-5，30m×0.25mm，d_f=0.25μm　　检测器：FID

柱　温：120℃(4min)→320℃，10℃·min^{-1}　　检测器温度：350℃

载　气：He，40cm·s^{-1}



色谱峰：1—对-氯苯酚；2—邻-氯苯酚；3—未定；4—2,4-二氯苯酚；5—3,5-二氯苯酚；6—2,4,6-三氯苯酚；7—2,4,5-三氯苯酚；8—3,4,5-三氯苯酚；9—2,3,5,6-四氯苯酚；10—2,3,4,6-四氯苯酚；11—五氯苯酚

色谱柱：OV-101，25m×0.3mm

柱　温：140℃

载　气：N_2

检测器：FID

检测温度：200℃

图 32-59　水中氯酚（一）[46]



色谱峰：1—4-溴酚；2—2,6-二氯酚；3—2,4-二氯酚；4—2,4,6-三氯酚；5—2,3,4,6-四氯酚；6—4,5,6-三氯愈疮木酚；7—五氯酚；8—四氯儿茶酚；9—内标物

色谱柱：OV-73，30m×0.3mm

柱　温：100℃→260℃，16℃·min^{-1}

载　气：H_2，2ml·min^{-1}

检测器：ECD

气化室温度：275℃

检测器温度：275℃

图 32-60　水中氯酚（二）[47]

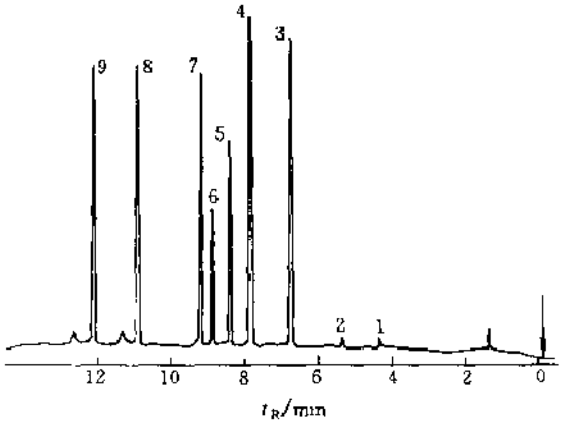


图 32-61 纸浆漂白液(氯代儿茶酚衍生物)[48]

色谱峰：1—3-氯代儿茶酚；2—4-氯代儿茶酚；3—3,6-二氯儿茶酚；4—3,5-二氯儿茶酚；5—3,4-二氯儿茶酚；6—4,5-二氯儿茶酚；7—3,4,6-三氯儿茶酚；8—3,4,5-三氯儿茶酚；9—四氯儿茶酚

色谱柱：SP-2100，25m×0.25mm

柱 温：90℃→190℃，4℃·min⁻¹

载 气：N_2，1ml·min⁻¹ 检测器：ECD

气化室温度：300℃ 检测器温度：300℃

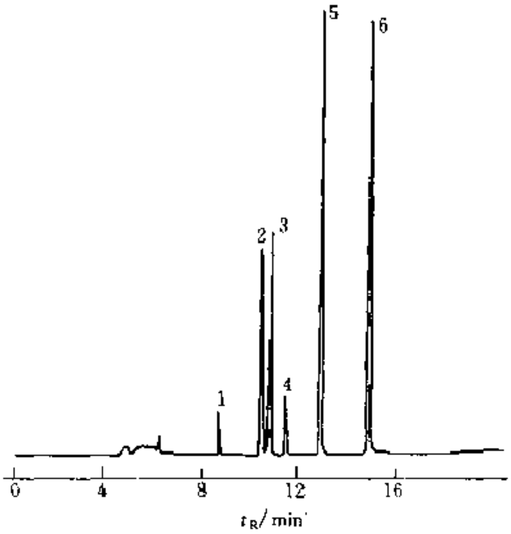


图 32-62 饮用水中卤代乙酸(甲酯衍生物)——US EPA 方法 552[8]

色谱峰：1—氯代乙酸；2—溴代乙酸；3—二氯代乙酸；4—溴一氯代乙酸；5—三氯代乙酸；6—二溴代乙酸

色谱柱：PTE-5，30m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱 温：50℃(10min)→200℃，10℃·min⁻¹

载 气：He，25cm·s⁻¹ 检测器：ECD

气化室温度：200℃ 检测器温度：300℃

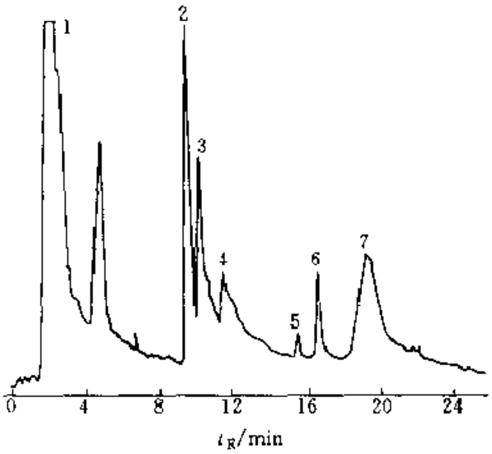


图 32-63 废水中卤代醚(一)——US EPA 方法 611[22]

色谱峰：1—己烷；2—双(2-氯乙基)醚；3—双(2-氯丙基)醚；4—双(2-氯乙氧基)甲烷；5—4-氯苯基苯基醚；6—4-溴苯基苯基醚；7—艾氏剂

色谱柱：Tenax GC(60目～80目)，1.8m×2mm

柱 温：150℃(4min)→310℃，16℃·min⁻¹

载 气：40ml·min⁻¹

检测器：Hall 电导检测器

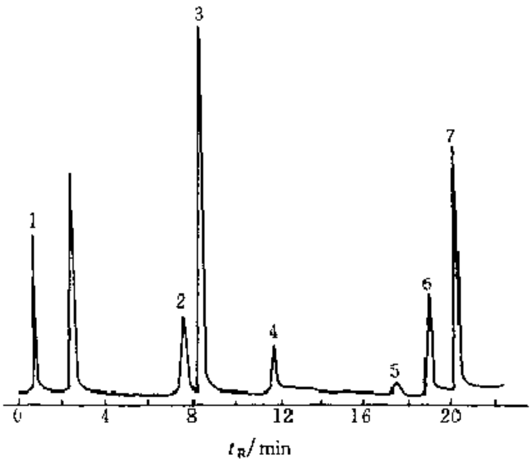


图 32-64 废水中卤代醚(二)——US EPA 方法 611[22]

色谱峰：1—己烷；2—双(2-氯丙基)醚；3—双(2-氯乙基)醚；4—双(2-氯乙氧基)甲烷；5—4-氯苯基苯基醚；6—4-溴苯基苯基醚；7—艾氏剂

色谱柱：3% SP-1000，Supelcoport(100目～120目)，1.8m×2mm

柱 温：60℃(2min)→230℃(4min)，8℃·min⁻¹

载 气：40ml·min⁻¹

检测器：Hall 电导检测器

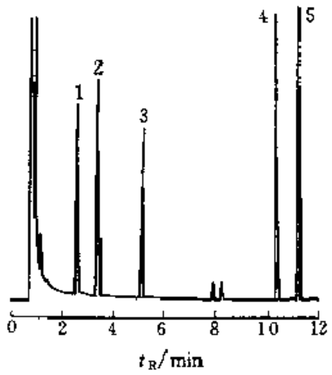


图 32-65 废水中卤代醚(三)——US EPA 方法 611[32]

色谱峰：1—双(2-氯乙基)醚；2—双(2-氯异丙基)醚；3—双(2-氯乙氧基)醚；4—4-氯苯基苯基醚；5—4-溴苯基苯基醚

色谱柱：DB-1301，30m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱　温：100℃(3min)→130℃，10℃·min→250℃，15℃·min^{-1}

载　气：H_2，40cm·s^{-1}　　检测器：FID

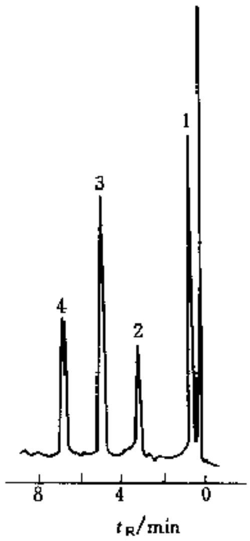


图 32-66 河水中烷基汞[34]

色谱峰：1—二甲基汞；2—二乙基汞；3—二丙基汞；4—二丁基汞

色谱柱：5% DC-200+3% QF-1，Gas Chrom Q(80 目～100 目)，1.83m×2mm

柱　温：70℃(2min)→180℃，20℃·min^{-1}

载　气：N_2，50ml·min^{-1}

检测器：FID

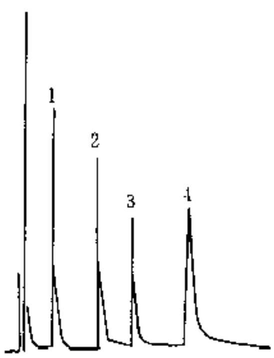


图 32-67 污水中丁基锡化合物(氢化衍生物)[35]

色谱峰：1—丁基锡；2—二丁基锡；3—三丁基锡；4—四丁基锡

色谱柱：3% OV-101，Chromsorb W HP(80 目～100 目)，2m×2mm

柱　温：40℃(2min)→170℃(5min)，32℃·min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FPD(滤光片 610nm)

气化室温度：200℃

检测器温度：220℃

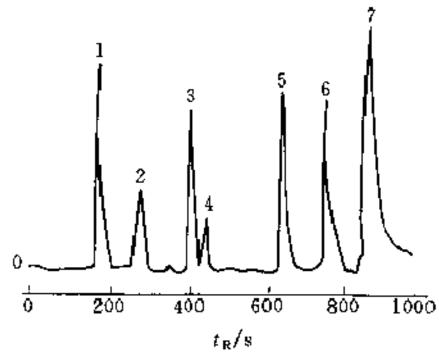


图 32-68 水中有机锡化合物[36]

色谱峰：1—甲基锡；2—二甲基锡；3—三甲基锡；4—丁基锡；5—二丁基锡；6—三丁基锡；7—四丁基锡(内标物)

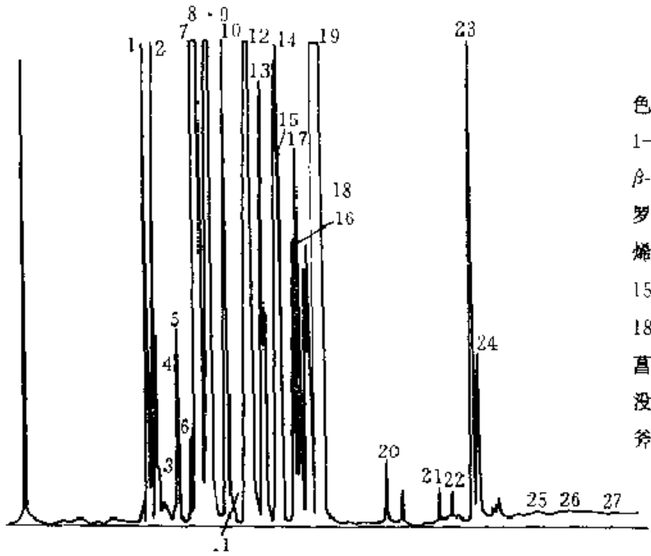
色谱柱：OV-101 涂于 Chromosorb G(0.13mm～0.15mm)

柱　温：80℃→220℃，40℃·min^{-1}

载　气：N_2

检测器：原子吸收仪

气化室温度：220℃



色谱峰：

1—α-蒎烯；2—莰烯；3—α-萜烯；4—蒈烯；5—β-蒎烯；6—α-水芹烯；7—1,4-桉叶素；8—α-罗勒烯；9—苎烯；10—Δ^3-蒈烯；11—香桃木烯醇；12—桧烯；13—葑醇；14—1,8-桉叶素；15—β-水芹烯；16—α-萜品油烯；17—龙脑；18—沉香醇；19—桂叶醇；20—α-萜品醇；21—菖蒲二烯；22—丁香烯；23—长叶烯；24—β-没药烯；25—α-香松烯；26—β-广藿香烯；27—斧柏烯

图 32-69 水中松油[31]

色谱柱：OV-101，27m×0.2mm　　检测器：MS

柱　温：80℃(8min)→200℃(12min)，3℃・min^{-1}　　气化室温度：230℃

载　气：He

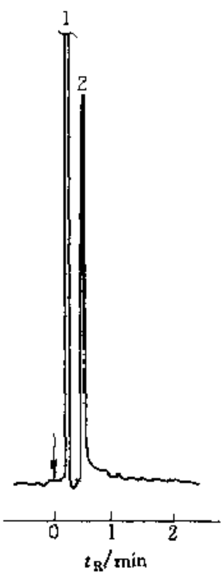


图 32-70 水中微量元素磷[49]

色谱峰：1—苯；2—元素磷

色谱柱：25% SE-30，6201 担体，1m×2mm

柱　温：195℃

载　气：N_2，45ml・min^{-1}

检测器：FPD

气化室温度：235℃

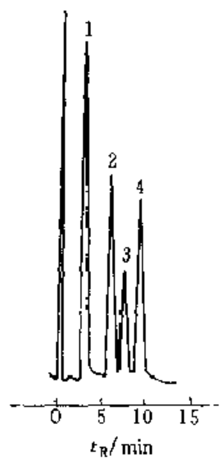


图 32-71 水中有机磷农药[33]

色谱峰：1—乐果；2—甲基对硫磷；3—马拉硫磷；4—乙基对硫磷

色谱柱：3.5% OV-101＋3.25% OV-210，Chromosorb W HP(80 目～100 目)，2m×3mm

柱　温：190℃　　载　气：N_2，50ml・min^{-1}

检测器：FPD　　气化室温度：220℃

检测器温度：220℃

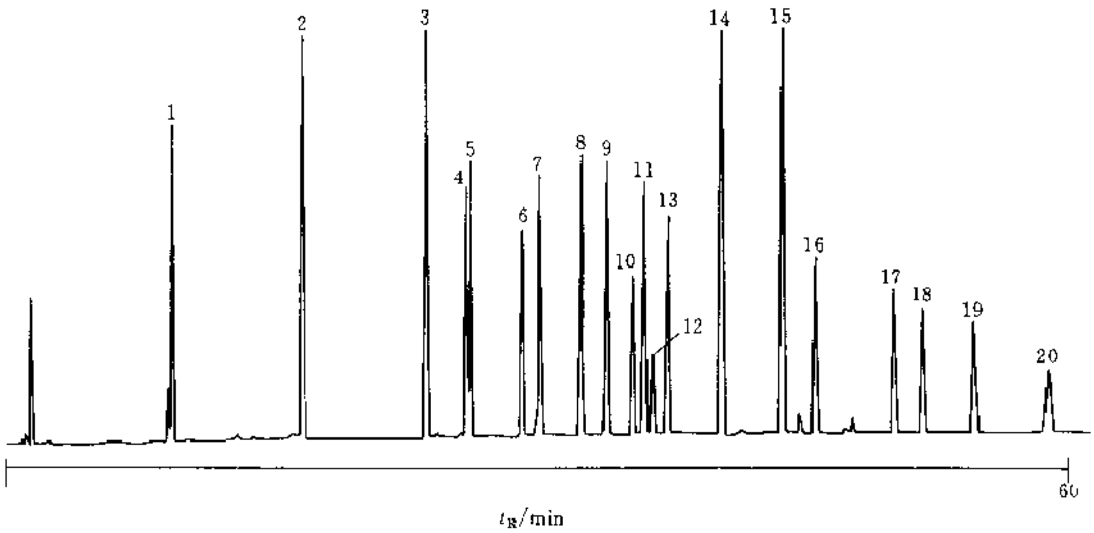


图 32-72 废水中有机磷杀虫剂——US EPA 方法 1618[15]

色谱峰：1—敌敌畏；2—敌百虫；3—灭克磷；4—甲拌磷；5—乐果；6—特丁磷；7—二嗪农；8—甲基一六〇五；9—皮蝇磷；10—马拉硫磷；11—乙基—六〇五；12—壤虫磷；13—脱叶亚磷 A；14—杀虫威；15—丰索磷；16—乙丙硫磷；17—苯硫磷；18—保棉磷；19—乙基保棉磷；20—蝇毒磷

色谱柱：DB-1，30m×0.53mm，d_f=1.5μm

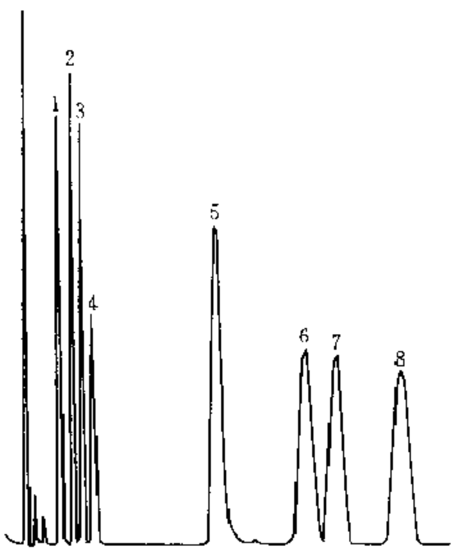
柱 温：100℃→250℃(10min)，3℃·min^{-1}

载 气：He，7ml·min^{-1}

检测器：FPD

气化室温度：250℃

检测器温度：250℃



色谱峰：1—α-六六六；2—γ-六六六；3—β-六六六；4—δ-六六六；5—p，p′-DDE；6—o，p′-DDT；7—p，p′-DDD；8—p，p′-DDT

色谱柱：1.5% OV-17+1.95% QF-1，Chromosorb W AW-DMCS(80 目～100 目)，2m×2.5mm

柱 温：180℃

载 气：N_2，60ml·min^{-1}

检测器：ECD

气化室温度：200℃

检测器温度：220℃

图 32-73 水中农药[53]

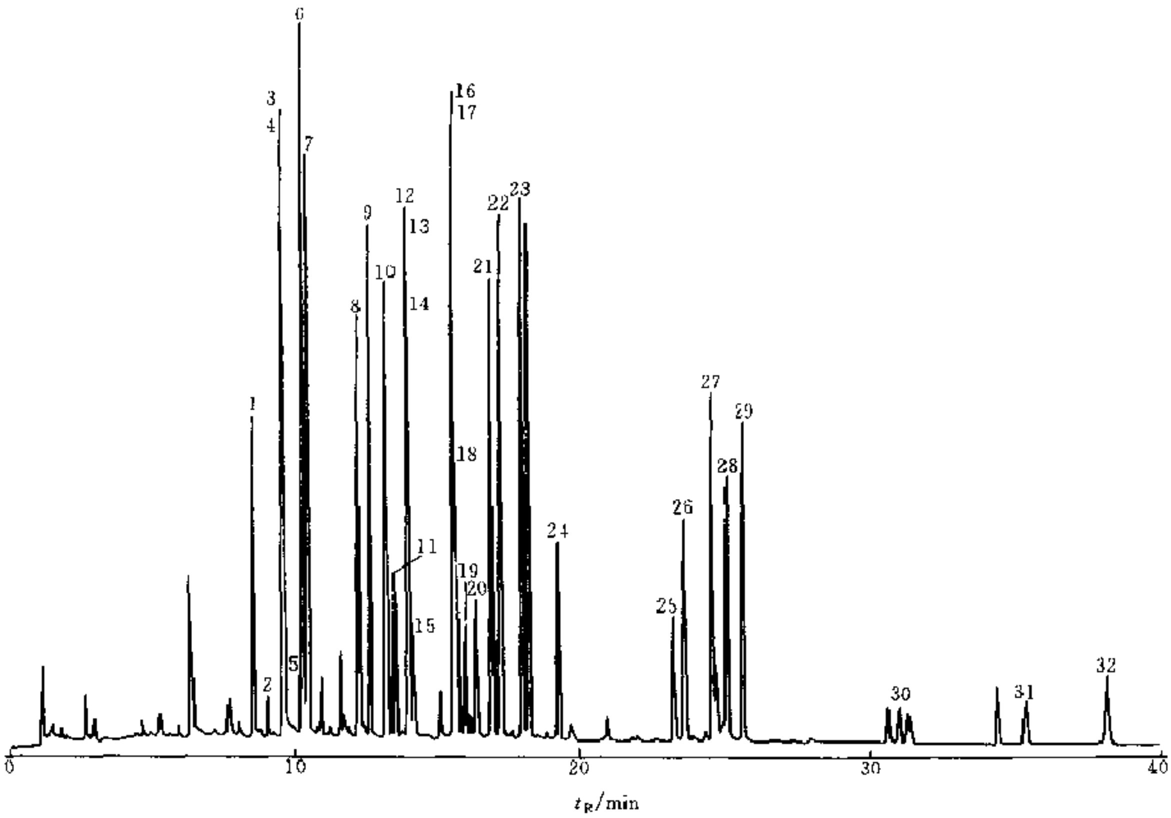


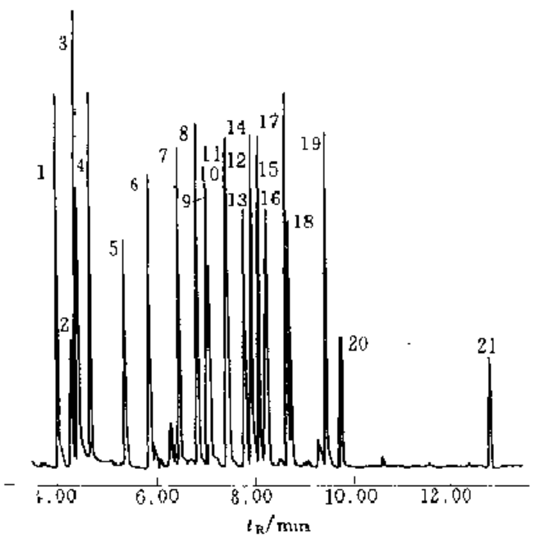
图 32-74 地下水中农药[52]

色谱峰：1—氟乐灵；2—甲拌磷；3—六氯苯；4—乐果；5—氯硝胺；6—林丹；7—五氯硝基苯；8—甲基毒死蜱；9—七氯；10—杀螟硫磷；11—马拉硫磷；12—艾氏剂；13—倍硫磷；14—毒死蜱；15—三氯杀螨醇；16—毒虫畏；17—灭蚜磷；18—克菌丹；19—灭菌丹；20—杀扑磷；21—硫丹 A；22—杀螨酯；23—狄氏剂；24—硫丹 B；25—亚胺硫磷；26—甲氧滴滴涕；27—三氯杀螨砜；28—伏杀磷；29—灭蚁灵；30—氯氰菊酯；31—氰戊菊酯；32—δ-迈秋灵

色谱柱：HP Ultra 2，25m×0.2mm，d_f=0.33μm

柱 温：90℃(1min)→180℃，30℃·min^{-1}→270℃(15min)，4℃·min^{-1}

检测器：ECD



色谱峰：1—α-六六六；2—β-六六六；3—γ-六六六；4—δ-六六六；5—七氯；6—艾氏剂；7—环氧七氯；8—γ 氯丹；9—硫丹 Ⅰ；10—α-氯丹；11—4,4′-滴滴伊；12—狄氏剂；13—异狄氏剂；14—硫丹 Ⅱ；15—4,4-滴滴滴；16—异狄氏剂醛；17—硫丹硫酸盐；18—4,4′-滴滴涕；19—异狄氏酮；20—甲氧滴滴涕；21—十氯联苯(内标物)

色谱柱：SPB-5，15m×0.20mm，d_f=0.25μm

检测器：ECD

图 32-75 饮用水中农药[54]

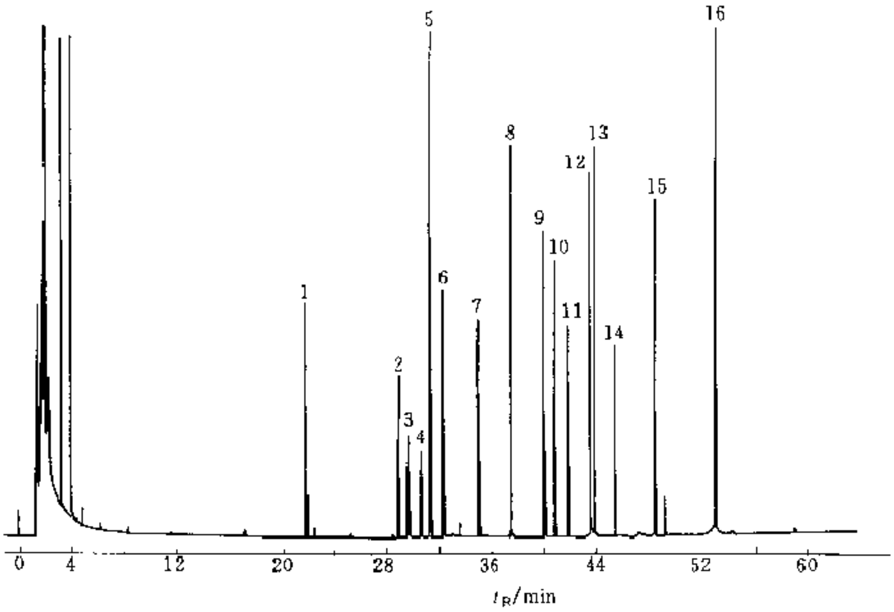


图 32-76 饮用水中含氯农药——US EPA 方法 508（一）[8]

色谱峰：1—氯唑灵；2—氟乐灵；3—六氯苯；4—β-六六六；5—五氯硝基苯（内标）；6—δ-六六六；7—七氯；8—敌稗；9—γ-氯丹；10—α-氯丹；11—4,4′-滴滴伊；12—乙酯杀螨醇；13—4,4′-滴滴滴；14—硫丹硫酸盐；15—甲氧滴滴涕；16—反-氯菊酯

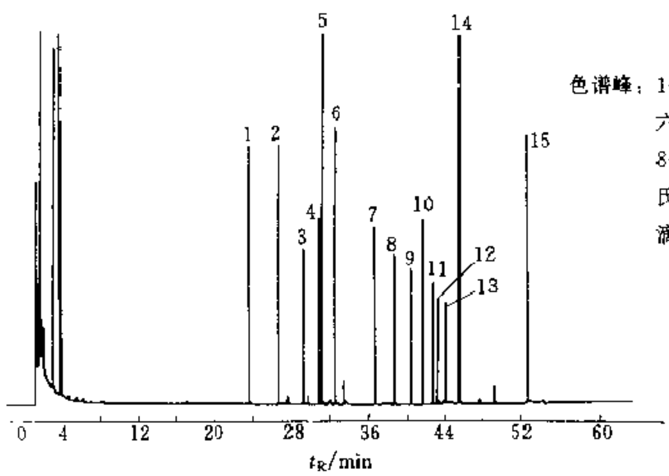
色谱柱：PTE-5，30m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱　温：60°C→300°C，4°C·min⁻¹

载　气：He，30cm·s⁻¹

检测器：TSD

检测器温度：325°C



色谱峰：1—草灭平；2—扑草胺；3—α-六六六；5—γ-六六六；6—五氯硝基苯（内标）；6—百菌清；7—艾氏剂；8—环氧七氯；9—硫丹Ⅰ；10—狄氏剂；11—异狄氏剂；12—硫丹Ⅱ；13—异狄氏剂醛；14—4,4′-滴滴涕；15—顺氯菊酯

图 32-77 饮用水中含氯农药——US EPA 方法 508（二）[8]

色谱柱：PTE-5，30m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱　温：60°C→300°C，4°C·min⁻¹

载　气：He，30cm·s⁻¹

检测器：ECD

检测器温度：310°C

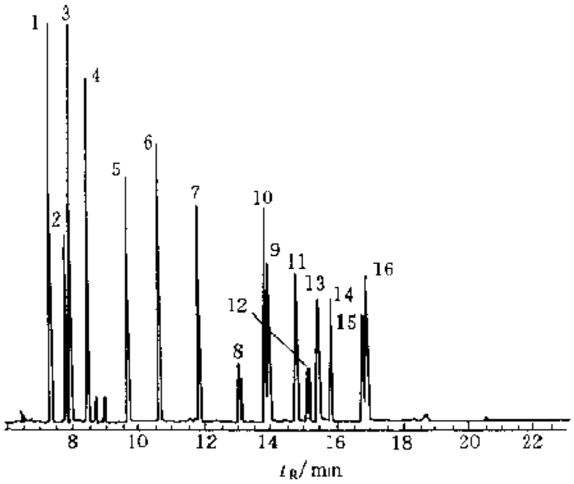


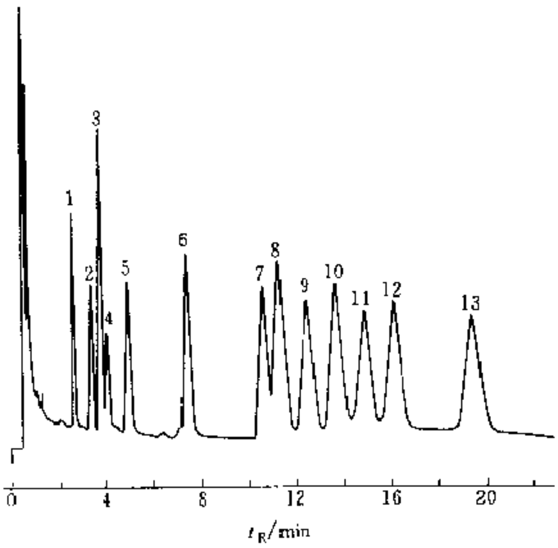
图 32-78 废水中有机氯农药——US EPA 方法 608 (一)[5]

色谱峰：1—α-六六六；2—β-六六六；3—γ-六六六；4—δ-六六六；5—七氯；6—艾氏剂；7—环氧七氯；8—硫丹Ⅰ；9—狄氏剂；10—4,4-滴滴伊；11—异狄氏剂；12—硫丹Ⅱ；13—4,4滴滴滴；14—异狄氏剂醛；15—硫丹硫酸盐；16—4,4滴滴涕

色谱柱：Ultra 2，25m×0.32mm，d_f=0.52μm　　检测器：ECD

柱　温：80℃→175℃，30℃·min^{-1}　　气化室温度：250℃

载　气：He　　检测器温度：350℃



色谱峰：1—α-六六六(50pg)；2—γ-六六六(50pg)；3—β-六六六(200pg)；4—七氯(50pg)；5—艾氏剂(100pg)；6—环氧七氯(160pg)；7—4,4′-滴滴伊(200pg)；8—狄氏剂(240pg)；9—2,4′-滴滴滴(400pg)；10—异狄氏剂(400pg)；11—2,4′-滴滴伊(450pg)；12—4,4′-滴滴滴(380pg)；13—4,4′-滴滴伊(520pg)

色谱柱：1.5% SP 2250 + 1.95%SP-2401，Supelcoport (100目～120目)，2m×4mm

柱　温：200℃

载　气：N_2，60ml·min^{-1}

检测器：ECD

图 32-79 废水中有机氯农药——US EPA 方法 608 (二)[6]

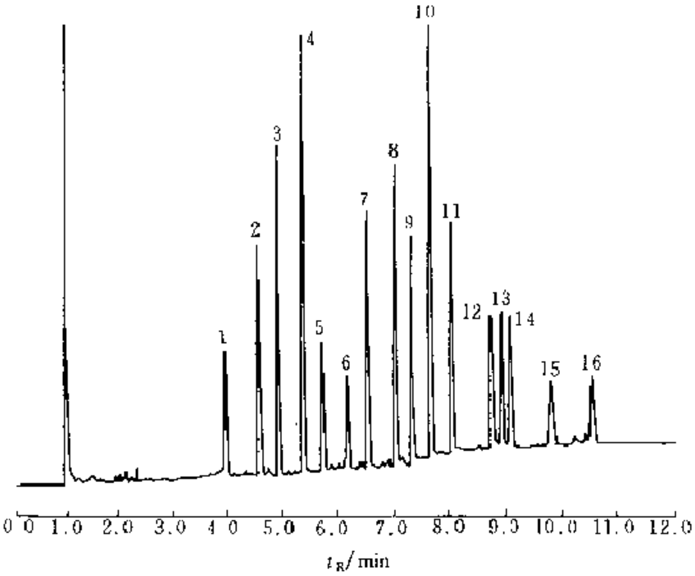


图 32-80 废水中有机氯农药——US EPA 方法 608（三）[76]

色谱峰：1—α-六六六；2—β-六六六；3—七氯；4—艾氏剂；5—环氧七氯；6—δ-六六六；7—γ-六六六；8—硫丹Ⅰ；9—p,p'-滴滴伊；10—狄氏剂；11—异狄氏剂；12—p,p'-滴滴滴；13—硫丹Ⅱ；14—p,p'-滴滴涕；15—异狄氏剂醛；16—硫丹硫酸盐

色谱柱：BP608，25m×0.32mm，d_f=0.25μm

柱　温：175→260℃(5min)，10℃·min^{-1}

检测器：ECD

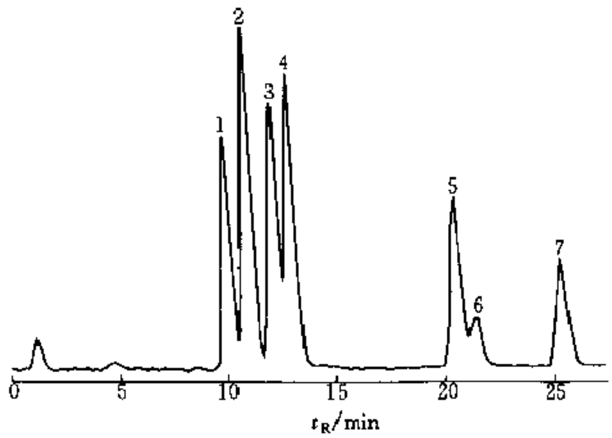


图 32-81 水中四氯二苯并对二噁英[37]

色谱峰：1—1,4,7,8-TCDD；2—2,3,7,8-TCDD；3—1,2,3,7-TCDD+1,2,3,8-TCDD；4—1,2,3,4-TCDD；5—1,2,7,8-TCDD；6—1,4,6,9-TCDD；7—1,2,6,7-TCDD（注：TCDD=四氯二苯并二噁英）

色谱柱：CP-Sil88，50m×0.22mm，d_f=0.20μm

柱　温：45℃(3min)→190℃，快速→240℃，5℃·min^{-1}

载　气：He

检测器：MS

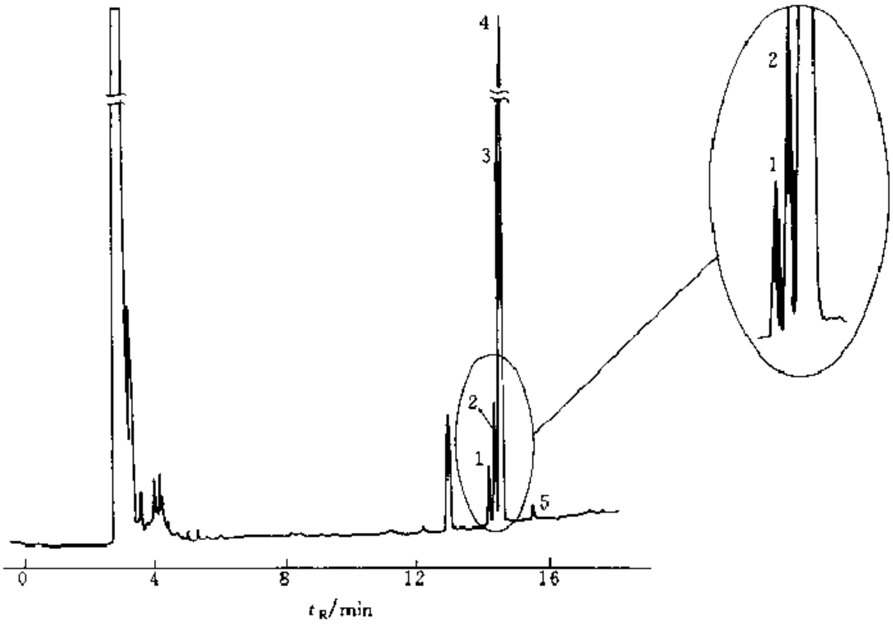


图 32-82 废水中四氯二苯并对二噁英——US EPA 方法 613[18]

色谱峰：1—1,4,7,8-TCDD；2—2,3,7,8-TCDD；3—1,2,3,4-TCDD；4—1,2,3,7-TCDD+1,2,3,8-TCDD；5—1,2,7,8-TCDD

色谱柱：SP-2331，60m×0.32mm，d_f=0.2μm

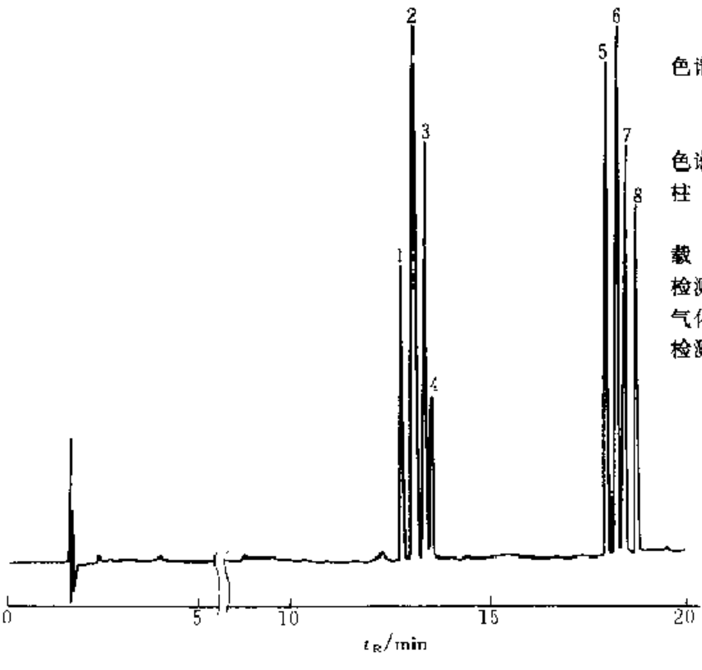
柱　温：200℃(1min)→250℃，3℃·min⁻¹

载　气：He，30cm·s⁻¹

检测器：ECD

气化室温度：250℃

检测器温度：270℃



色谱峰：1—扑灭津；2—阿特拉津；3—西玛津；4—特丁津；5—扑草净；6—莠灭净；7—西草净；8—去草净

色谱柱：DB-35，30m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱　温：170℃(1min)→195℃，2℃·min⁻¹→230℃(3min)，5℃·min⁻¹

载　气：He

检测器：NPD

气化室温度：250℃

检测器温度：250℃

图 32-83 水中三氮杂苯[15]

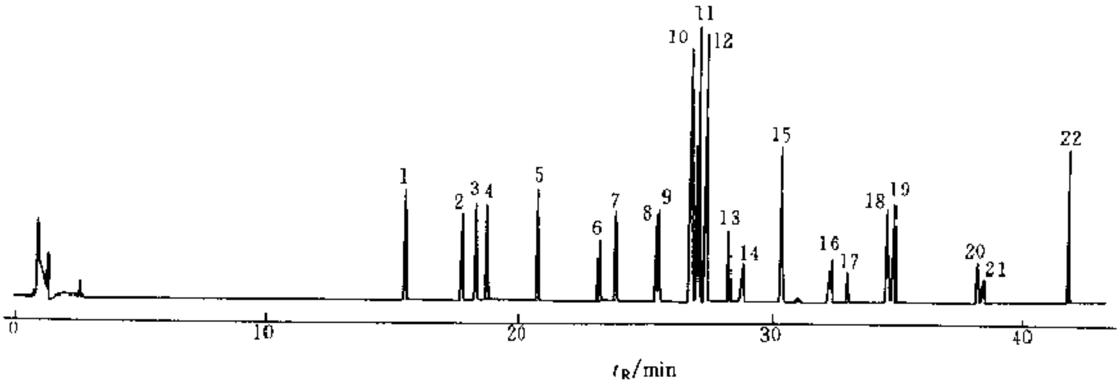


图 32-84 饮用水中含氮除莠剂——US EPA 方法 507[8]

色谱峰：1—扑草灭；2—苏达灭；3 灭草猛；4—克草猛；5—草达灭；6 扑草胺；7—草灭特；8—氟乐灵；9 · 氟草胺；10 - 西玛津；11 · 阿特拉津；12—扑灭津；13 · 卡乐施；14—特草定；15—赛克津；16 - 除草安；17—丙草安；18—异乐灵；19 -- 胺硝草；20—恶草灵；21—氟硝草醚；22--六嗪同

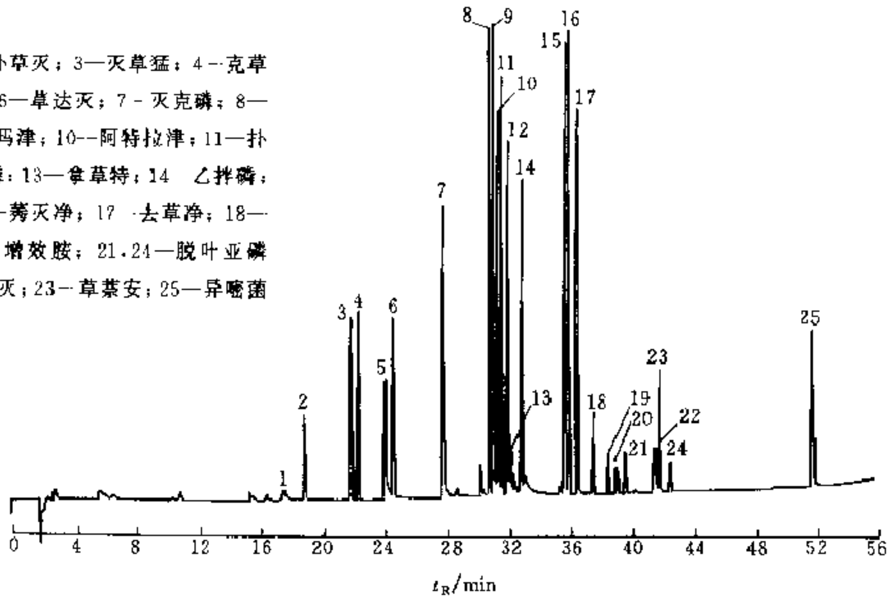
色谱柱：PTE-5，30m×0.25mm，d_f=0.25μm

检测器：TSD

柱 温：60℃→300℃，4℃ · min^{-1}

检测器温度：325℃

载 气：He，30cm · s^{-1}



色谱峰：

1 敌敌畏；2—扑草灭；3—灭草猛；4—克草猛；5—丁唑隆；6—草达灭；7 - 灭克磷；8—阿特拉通；9-- 西玛津；10--阿特拉津；11—扑灭津；12—特丁磷；13—拿草特；14 乙拌磷；15—草不绿；16—莠灭净；17 -去草净；18—丙草安；19、20 增效胺；21、24—脱叶亚磷(峰 1)；22—苏达灭；23—草萘安；25—异嘧菌醇

图 32-85 饮用水中农药——US EPA 方法 507[32]

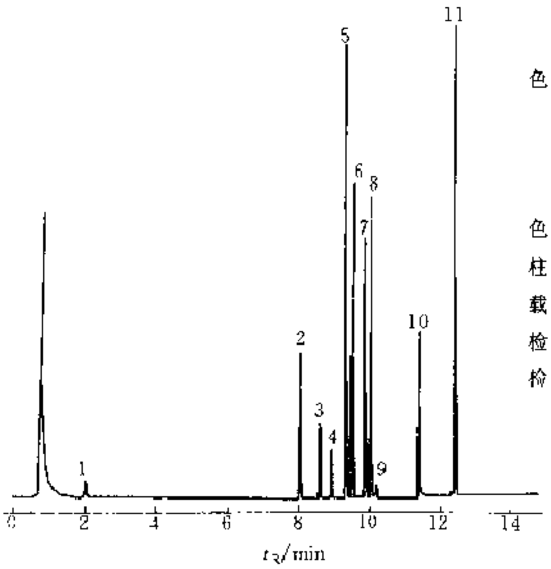
色谱柱：SE-54，30m×0.32mm，d_f=0.25μm

柱 温：60℃→300℃，4℃ · min^{-1}

载 气：He，1.45ml · min^{-1}

检测器：NPD

检测器温度：300℃



色谱峰：1—茅草枯；2—二氯甲氧苯酸；3—2,4 滴丙酸；4 2,4-滴；5—定草酯；6—2,4,5 涕丙酸；7—2,4,5 涕；8 地乐酚；9—2,4 滴丁酸；10—毒莠定；11—布来

色谱柱：SPB-608，15m×0.53mm，d_f＝0.5μm

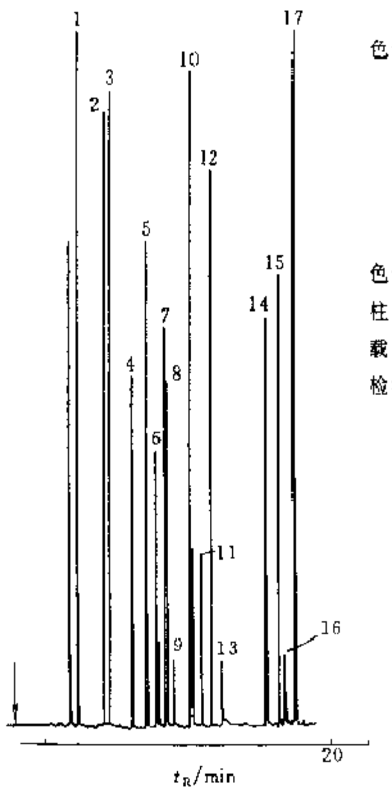
柱　温：60℃(1min)→280℃(5min)，16℃・min^{-1}

载　气：He，5ml・min^{-1}

检测器：ECD

检测器温度：310℃

图 32-86　废水中除莠剂——US EPA 方法 615[b]



色谱峰：1—乙腈；2—甲基乙基酮；3—仲丁醇；4—1,2-二氯乙烷；5—苯；6 1,1-二氯丙烷；7 1，2-二氯丙烷；8—2,3-二氯丙烷；9—氯甲代氧丙环；10—甲基异丁基酮；11—反 1,3 二氯丙烷；12—甲苯；13—未定；14—对二甲苯；15 1,2,3-三氯丙烷；16—2,3-二氯取代的醇；17-乙基戊基酮

色谱柱：CP-Sil 5CB，25m×0.32mm

柱　温：35℃(3min)→220℃，10℃・min^{-1}

载　气：H_2

检测器：FID

图 32-87　水中溶剂（一）[68]

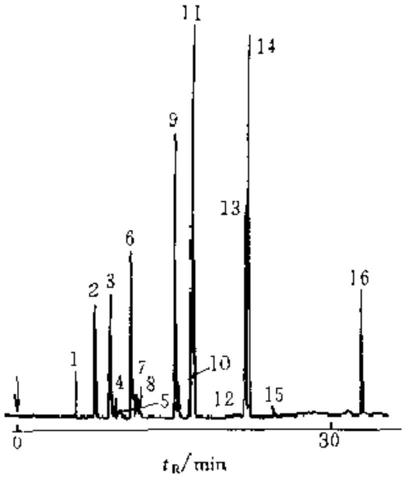


图 32-88　水中溶剂（二）[60]

色谱峰：1—丙酮；2—四氢呋喃；3—丁酮；4—甲醇；5—二氯甲烷；6—苯；7—丙醇-2；8—乙醇；9—甲基异丁基酮；10—三氯甲烷；11—甲苯；12—乙基苯；13—间二甲苯；14—对二甲苯；15—邻二甲苯；16—二甲基甲酰胺

色谱柱：CP-Wax 57CB，25m×0.32mm，d_f=1.2μm

柱　温：40℃（10min）→150℃，4℃·min⁻¹

载　气：N_2

检测器：FID

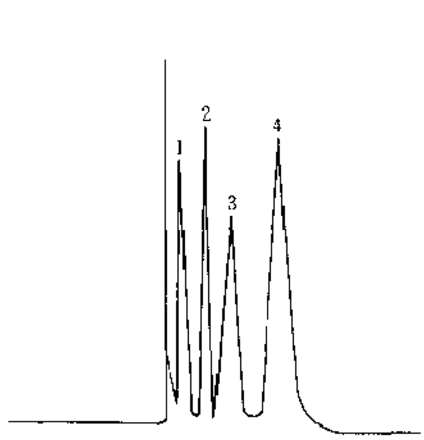


图 32-89　水中火炸药[59]

色谱峰：1—二硝基甲苯；2—三硝基甲苯；3—1,5-二硝基萘；4—黑索金

色谱柱：3%QF-1，Chromosorb G AW-DMCS（60 目～80 目），1.5m×2mm

柱　温：180℃

载　气：N_2，100ml·min^{-1}

检测器：ECD

气化室温度：210℃

检测器温度：250℃

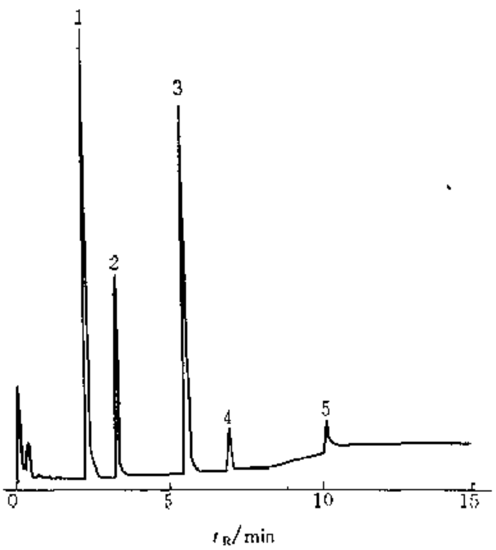


图 32-90　水中炸药[61]

色谱峰：1—2,6-二硝基甲苯；2—2,4-二硝基甲苯；3—2,4,6-三硝基甲苯；4—环三亚甲基三硝胺；5—2,4,6-三硝基苯替甲硝胺

色谱柱：DB-1，8.5m×0.25mm

柱　温：125℃(3min)→150℃，8℃·min^{-1}→190℃，10℃·min^{-1}

载　气：He，64cm·s^{-1}　　检测器：ECD

气化室温度：190℃　　检测器温度：190℃

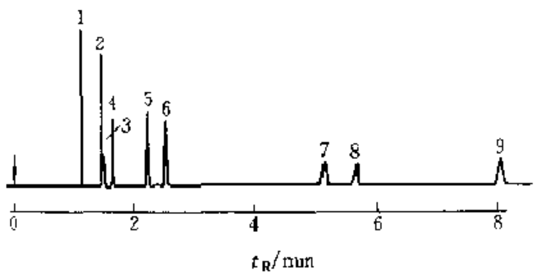


图 32-91　水中醇和酮[62]

色谱峰：1—丙酮；2—甲基乙基酮；3—二氯甲烷；4—异丙醇；5—甲基异丁基酮；6—仲丁醇；7—1-二异丁基酮；8—2-二异丁基酮；9—乙基戊基酮

色谱柱：CP-Wax 57 CB，10m×0.10mm，d_f=0.2μm

柱　温：60℃

载　气：N_2，150kPa

检测器：FID

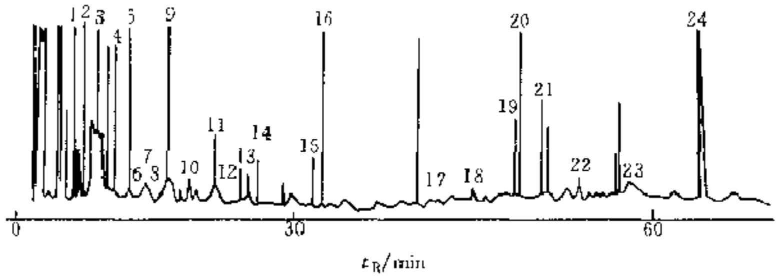


图 32-92　工厂地下水[65]

色谱峰：1—4-甲基-2-己酮；2—乙苯；3—对二甲苯；4—庚醛；5—5-甲基-2-庚酮；6—苯甲醛；7—丙苯；8—1,3,5-三甲苯；9—辛醛；10—苯乙酮；11—异佛尔酮；12—二甲酚；13—壬醇；14—萘；15—邻苯二甲酸二甲酯；16—六甲苯；17—α-六六六；18—蒽；19—C_{19}；20—邻苯二甲酸二丁酯；21—荧蒽；22—C_{21}；23—C_{23}；24—C_{25}

色谱柱：SE 30，50m×0.25mm

柱　温：70℃(2min)→265℃(60min)，4℃・min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FID

气化室温度：260℃

检测器温度：280℃

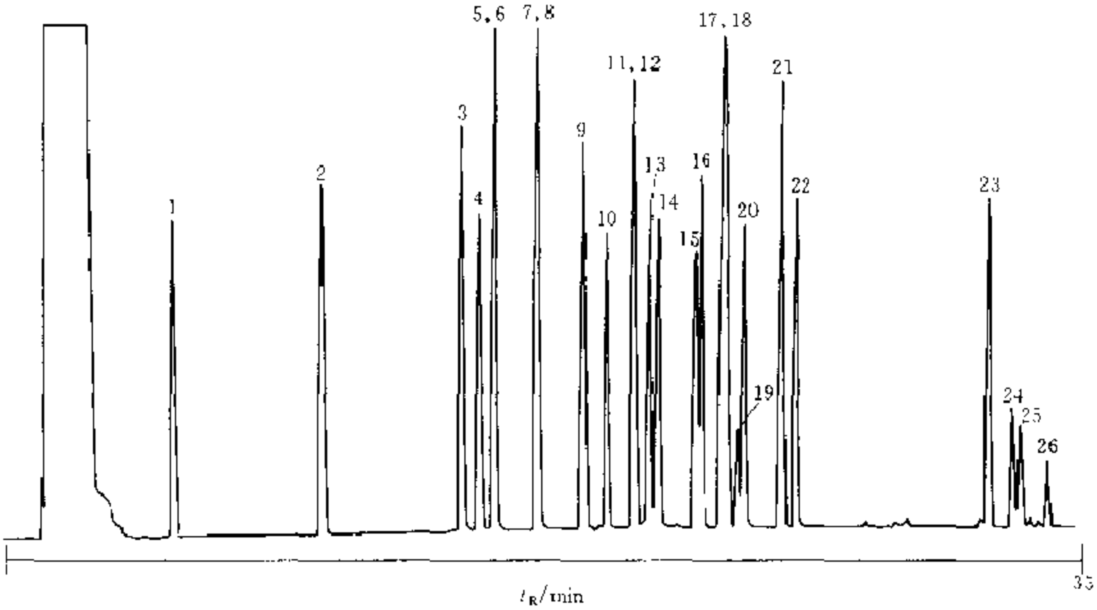


图 32-93　饮用水中可汽提芳烃与不饱和有机化合物——US EPA 方法 503.1[15]

色谱峰：1—苯；2—甲苯；3—氯苯；4—乙苯；5—1,3-二甲苯；6—1,4-二甲苯；7—1,2-二甲苯；8—苯乙烯；9—异丙基苯；10—溴苯；11—正丙基苯；12—2-氯甲苯；13—4-氯甲苯；14—1,3,5-三甲苯；15—叔丁基苯；16—1,2,4-三甲苯；17—1,3-二氯苯；18—仲丁基苯；19—1,4-二氯苯；20—4-异丙基甲苯；21—1,2-二氯苯；22—正丁基苯；23—1,2,4-三氯苯；24—萘；25—1,3-六氯丁二烯；26—1,2,3-三氯苯

色谱柱：DB 624，30m×0.53mm，d_f=3.0μm

柱　温：40℃(5min)→135℃，3℃・min^{-1}

载　气：He，8ml・min^{-1}

检测器：FID

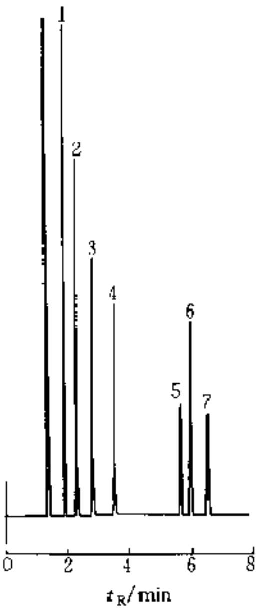


图 32-94　废水中可汽提芳烃——US EPA 方法 602[26]

色谱峰：1—苯；2—甲苯；3—乙基苯；4—氯苯；5—1,3-二氯苯；6—1,4-二氯苯；7—1,2-二氯苯

色谱柱：BP20，25m×0.53mm，d_f=1.0μm

柱　温：80℃→160℃，10℃·min⁻¹

检测器：FID

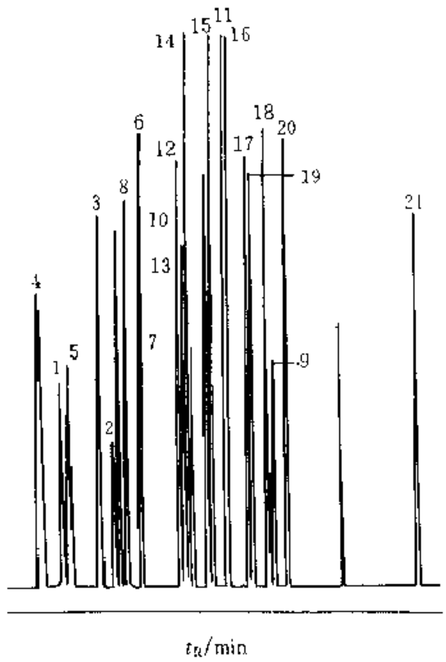


图 32-95　水中挥发性氯化合物与芳烃[65]

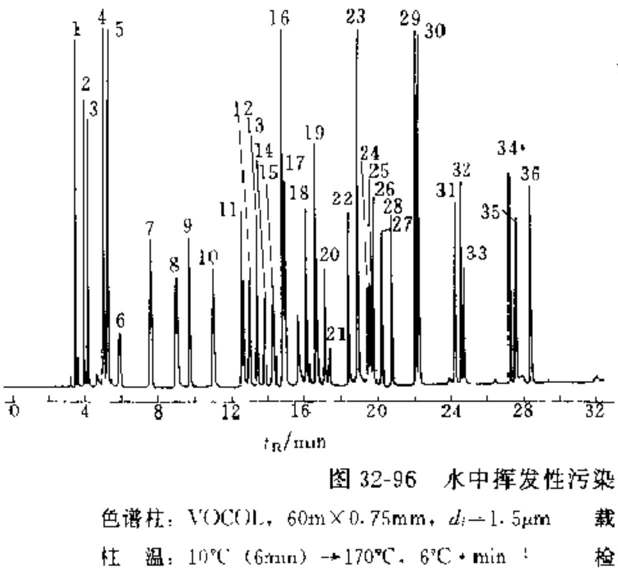
色谱峰：1—二氯甲烷；2—氯仿；3—1,1,1-三氯乙烷；4—四氯化碳；5—苯；6—二氯乙烷；7—溴二氯甲烷；8—甲苯；9—二溴一氯甲烷；10—四氯乙烯；11—氯代苯；12—乙基苯；13—对二甲苯；14—间二甲苯；15—邻二甲苯；16—正丙基苯；17—1,3,5-三甲基苯；18—1,2,4-三甲基苯；19—仲丁基苯；20—正丁基苯；21—萘

色谱柱：DB-Wax，30m×0.53mm，d_f=1μm（不包括预柱）

柱　温：30℃(3min)→110℃，5℃·min⁻¹→175℃，20℃·min⁻¹

载　气：He　　　检测器：FID

气化室温度：200℃　检测器温度：200℃

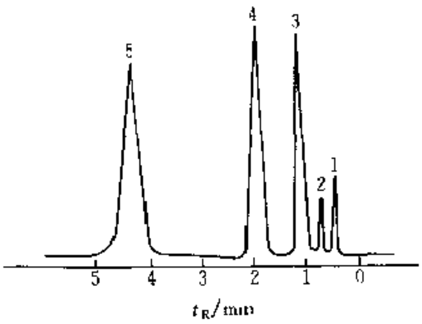


色谱峰：1—二氯二氟甲烷；2—氯代甲烷；3—氯乙烯；4—溴代甲烷；5—氯代乙烷；6—三氯一氟甲烷；7—1,1-二氯乙烯；8—二氯甲烷；9—反-1,2-二氯乙烯；10—1,1-二氯乙烷；11—顺-1,2-二氯乙烯；12—氯仿；13—溴一氯甲烷；14—1,1,1-三氯乙烷；15—四氯化碳；16—苯；17—1,2-二氯乙烷；18—三氯乙烯；19—1,2-二氯丙烷；20—溴二氯甲烷；21—2-氯乙基乙烯基醚；22—顺-1,3-二氯丙烯；23—甲苯；24—反-1,3-二氯丙烯；25—1-氯-2-溴丙烷；26—1,1,2-三氯乙烷；27—四氯乙烯；28—二溴一氯甲烷；29—氯苯；30—乙基苯；31—溴仿；32—1,4-二氯丁烷；33—1,1,2,2-四氯乙烷；34—1,2-二氯苯；35—1,4-二氯苯；36—1,3-二氯苯

图 32-96　水中挥发性污染物[90]

色谱柱：VOCOL，60m×0.75mm，d_f=1.5μm　　载　气：He，10ml·min⁻¹

柱　温：10℃（6min）→170℃，6℃·min⁻¹　　检测器：FID



色谱峰：1—乙烯基乙炔；2—乙醛；3—氯丁二烯；4—苯；5—二氯丁烯

色谱柱：将10%聚乙二醇己二酸酯、10%Apiezon L分别涂渍在60目～80目的6201担体，以5∶1比例混合

柱温：90℃

载气：N_2，30ml・min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：120℃

检测器温度：140℃

进样方式：顶空法

图 32-97 水源水中氯丁二烯[66]

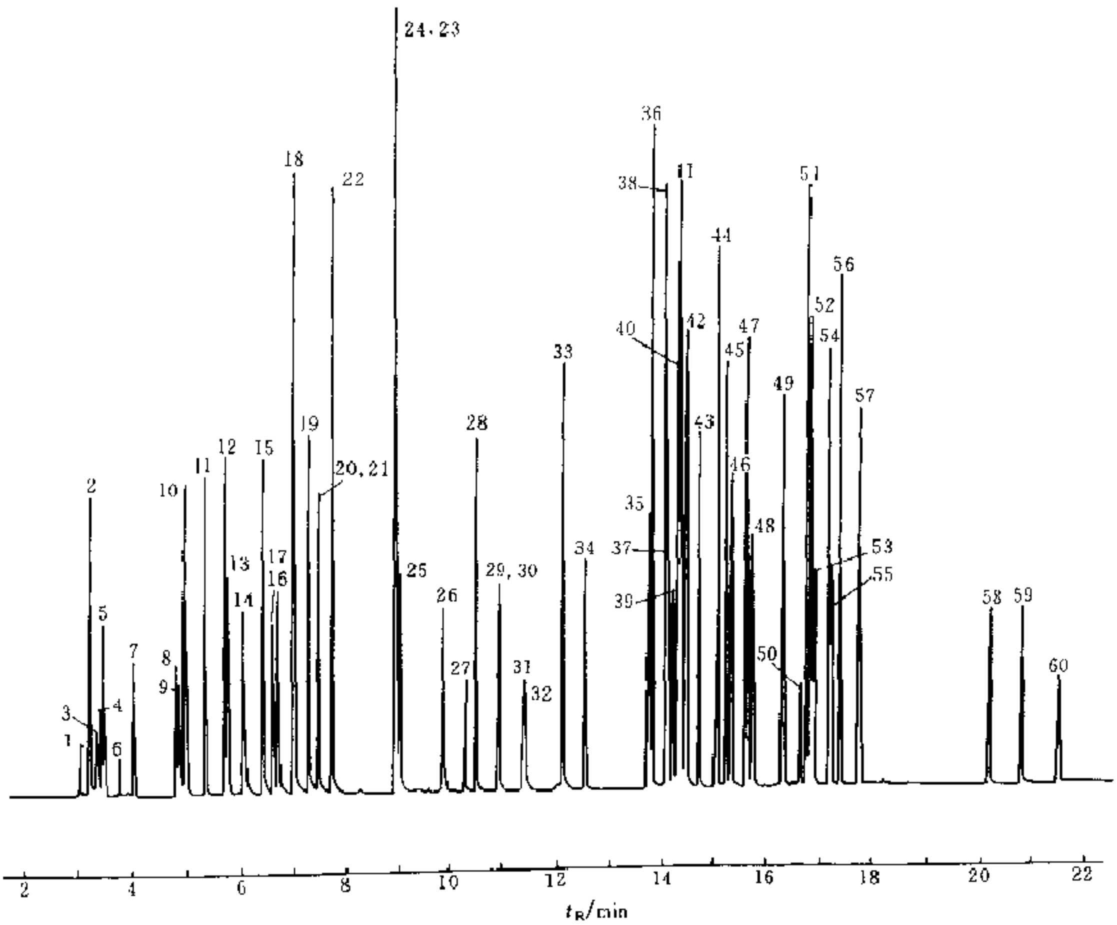


图 32-98 水中常见卤代烃与芳烃类污染物[67]

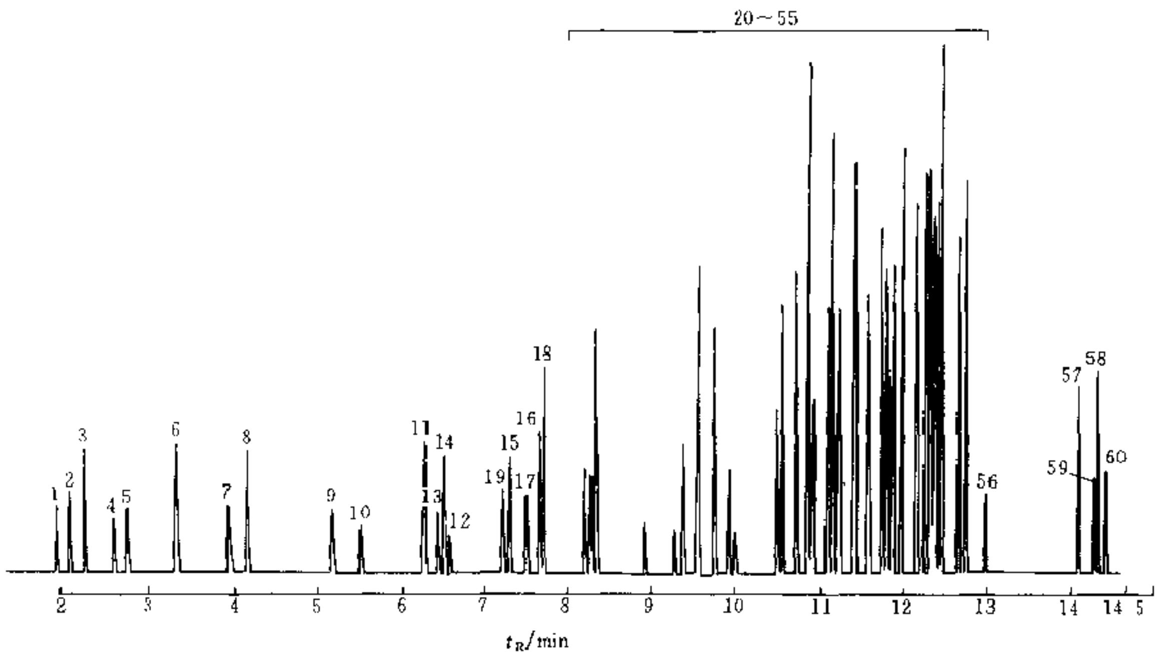
色谱峰：1—氯代甲烷；2—二氯二氟甲烷；3—溴代甲烷；4—氯乙烯；5—氯乙烷；6—三氯一氟甲烷；7—1,1-二氯乙烯；8—反-1,2-二氯乙烯；9—1,1-二氯乙烯；10—二氯甲烷；11—2,2-二氯丙烷；12—顺-1,2-二氯乙烯；13—1,1,1-三氯乙烷；14—四氯化碳；15—氯仿；16—1,1-二氯丙烯；17—1,2-二氯乙烷；18—苯；19—一溴一氯甲烷；20—三氯乙烯；21—反-1,3-二氯丙烯；22—1,2-二氯丙烷；23—二溴甲烷；24—一溴二氯甲烷；25—顺-1,3-二氯丙烯；26—1,3-二氯丙烷；27—1,1,2-三氯乙烷；28—四氯乙烯；29—1,2-二溴乙烷；30—二溴一氯甲烷；31—1,1,1,2-四氯乙烷；32—甲苯；33—氯代苯；34—乙基苯；35—异丙基苯；36—溴仿；37—溴代苯；38—对二甲苯；39—苯乙烯；40—1,2,3-三氯丙烷；41—间二甲苯；42—邻二甲苯；43—正丙基苯；44—1,1,2,2-四氯乙烷；45—特丁基苯；46—4-氯甲苯；47—仲丁基苯；48—2-氯甲苯；49—1,3-二氯苯；50—1,4-二氯苯；51—4-异丙基甲苯；52—六氯丁二烯；53—1,2-二氯苯；54—正丁基苯；55—1,2,4-三甲基苯；56—1,3,5-三甲基苯；57—1,2-二溴-3-氯丙烷；58—1,2,4-三氯苯；59—1,2,3-三氯苯；60—萘

色谱柱：Carbograph 1＋AT1000，60m×0.25mm

载气：He，30cm・s^{-1}

柱温：35℃(2min)→230℃，120℃・min^{-1}

检测器：FID



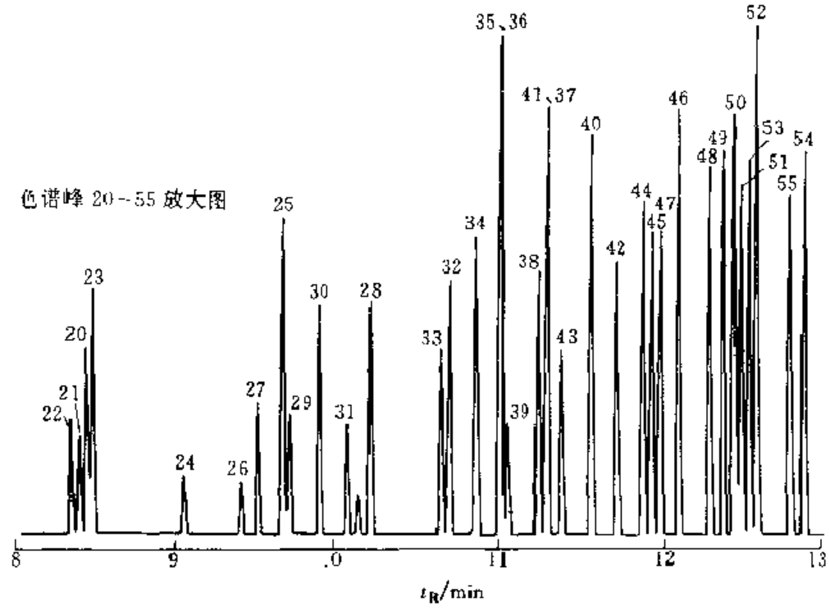


图 32-99 饮用水中易挥发有机化合物——US EPA 方法 524.2[18]

色谱峰：1—二氯二氟甲烷；2—氯代甲烷；3—氯乙烯；4—溴代甲烷；5—氯代乙烷；6—三氯一氟甲烷；7—1,1-二氯乙烯；8—二氯甲烷；9—反-1,2-二氯乙烯；10—1,1-二氯乙烷；11—顺-1,2-二氯乙烯；12—2,2-二氯丙烷；13—一溴一氯甲烷；14—氯仿；15—1,1,1-三氯乙烷；16—四氯化碳；17—1,1-二氯丙烯；18—苯；19—1,2-二氯乙烷；20—三氯乙烯；21—1,2-二氯丙烷；22—二溴甲烷；23—一溴二氯甲烷；24—顺-1,3-二氯丙烯；25—甲苯；26—反-1,3-二氯丙烯；27—1,1,2-三氯乙烷；28—四氯乙烯；29—1,3-二氯丙烷；30—二溴一氯甲烷；31—1,2-二溴乙烷；32—氯苯；33—1,1,1,2-四氯乙烷；34—乙苯；35—间二甲苯；36—对二甲苯；37—邻二甲苯；38—苯乙烯；39—溴仿；40—异丙苯；41—1,1,2,2-四氯乙烷；42—溴苯；43—1,2,3-三氯丙烷；44—正丙苯；45—2-氯甲苯；46—1,3,5-三甲苯；47—4-氯甲苯；48—叔丁基苯；49—1,2,4-三甲基苯；50—仲丁基苯；51—1,3-二氯苯；52—对异丙基甲苯；53—1,4-二氯苯；54—正丁基苯；55—1,2-二氯苯；56—1,2-二溴-3-氯丙烷；57—1,2,4-三氯苯；58—六氯丁二烯；59—萘；60—1,2,3-三氯苯

色谱柱：DB-VRX，30m×0.25mm，d_f＝1.4μm　　载　气：He

柱　温：35℃(5min)→220℃(1min)，20℃·min⁻¹　　检测器：MS

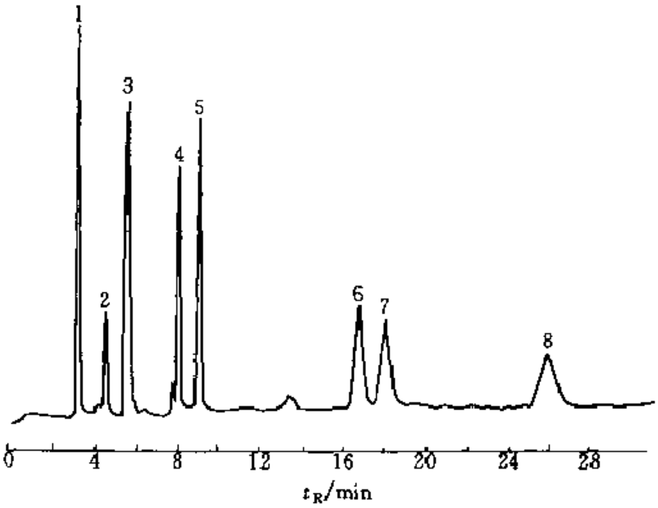


图 32-100 废水中可汽提芳烃 —US EPA 方法 602[22]

色谱峰：1—苯；2—2,2,2-三氟甲苯；3—甲苯；4—乙苯；5—氯苯；6—1,4-二氯苯；7—1,3-二氯苯；8—1,2-二氯苯

色谱柱：5%SP-1200+1.75%Bentone-34、Supelcoper 担体（100 目～120 目），1.8m×2.2mm

柱　温：50℃（2min）→90℃，6℃·min⁻¹

载　气：He，36ml·min⁻¹

检测器：光离子检测器

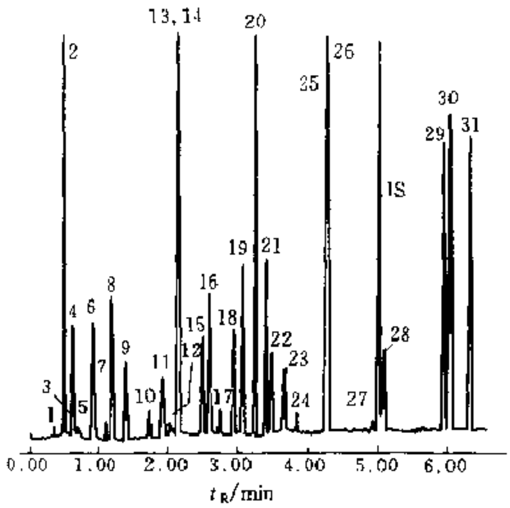


图 32-101 废水中可汽提卤代烃（一）—US EPA 方法 624[68]

色谱峰：1—氯甲烷；2—氯乙烯；3—溴甲烷；4—氯乙烷；5—三氯一氟甲烷；6—1,1-二氯乙烯；7—二氯甲烷；8—反-1,2-二氯乙烯；9—1,1-二氯乙烷；10—氯仿；11—1,1,1-三氯乙烷；12—四氯化碳；13—1,2-二氯乙烷；14—苯；15—三氯乙烯；16—1,2-二氯丙烷；17—一溴二氯甲烷；18—2-氯乙基乙烯醚；19—顺-1,3-二氯丙烯；20—甲苯；21—反-1,3-二氯丙烯；22—1,1,2-三氯乙烷；23—四氯乙烯；24—二溴一氯甲烷；25—氯苯；26—乙基苯；27—溴仿；28—1,1,2,2-四氯乙烷；29—1,3-二氯苯；30—1,4-二氯苯；31—1,2-二氯苯

色谱柱：VOCOL，10m×0.20mm，d_f=1.2μm

柱　温：40℃(0.75min)→160℃，20℃·min⁻¹

载　气：He，40cm·s⁻¹(40℃)

检测器：MS

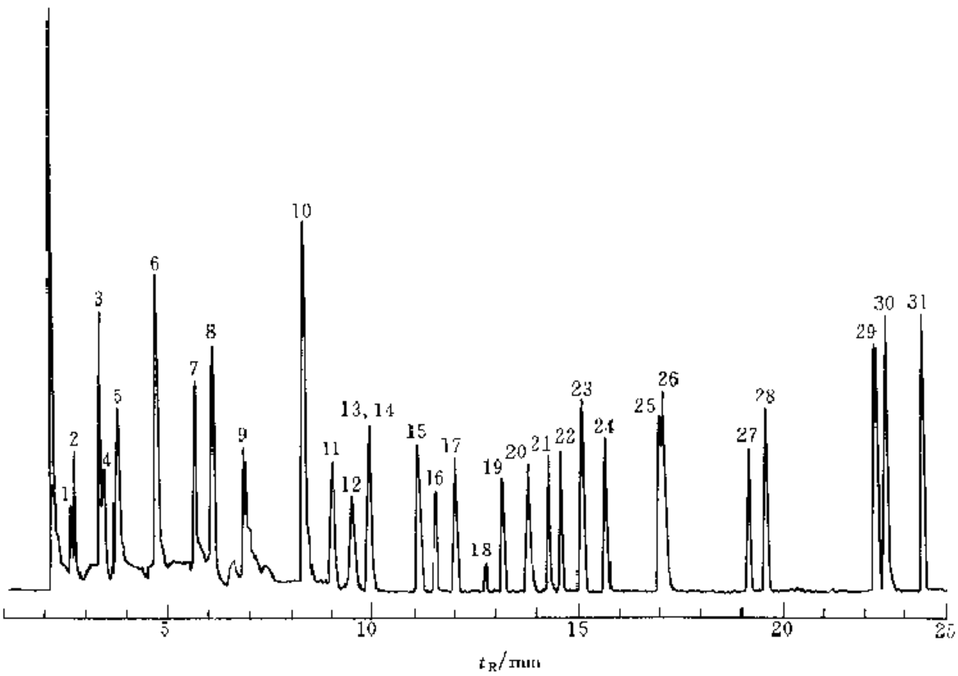


图 32-102 废水中可汽提卤代烃（二）——US EPA 方法 624[4]

色谱峰：1—氯甲烷；2—氯乙烯；3—溴甲烷；4—氯乙烷；5—三氯一氟甲烷；6—1,1-二氯乙烯；7—二氯甲烷；8—1,2二氯乙烯；9—1,1-二氯乙烷；10—氯仿；11—四氯乙烷；12—四氯化碳；13—苯；14—1,2-二氯乙烷；15—三氯乙烯；16—1,2-二氯丙烷；17—一溴二氯甲烷；18—2氯乙基乙烯醚；19—顺1,3二氯丙烯；20—甲苯；21—反1,3二氯丙烯；22—1,1,2-三氯乙烷；23—四氯乙烯；24—二溴一氯甲烷；25—氯苯；26—乙苯；27—溴仿；28—1,1,2,2四氯乙烷；29—1,3二氯苯；30—1,4二氯苯；31—1,2二氯苯

色谱柱：VOCOL，60m×0.53mm，d_f=3.0μm　　载　气：He，7.5ml・min^{-1}

柱　温：35°C(4min)→200°C，6°C・min^{-1}　　检测器：MS

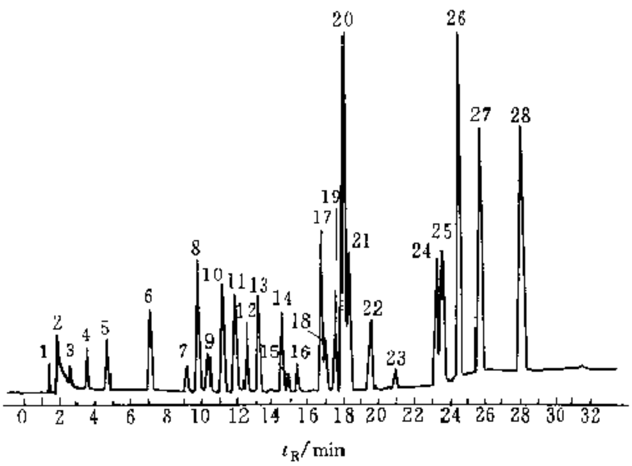


图 32-103 污水中有机污染物（一）[70]

色谱峰：1—氯甲烷；2—甲醇；3—氯乙烯＋二氯二氟甲烷；4—溴甲烷；5—氯乙烷；6—二氯甲烷；7—三氯氟甲烷；8—1,1-二氯乙烯；9—溴氯甲烷；10—1,1-二氯乙烷；11—反-1,2-二氯乙烯；12—氯仿；13—1,2-二氯乙烷；14—1,1,1-三氯乙烷；15—四氯化碳；16—溴二氯甲烷；17—1,2-二氯丙烷；18—反-1,3-二氯丙烯；19—三氯乙烯；20—苯；21—顺-1,3-二氯丙烯＋1,1,2-三氯乙烷＋氯二溴甲烷；22—1-氯-2-溴丙烷(内标物)；23—溴仿；24—1,1,2,2四氯乙烯＋1,1,2,2-四氯乙烷；25—1,4-二氯丁烷（内标物）；26—甲苯；27—氯苯；28—乙基苯

色谱柱：1% SP 1000，Carbopack B(60 目～80 目)；2.66m×3mm　　检测器：FID

柱　温：45°C(3min)→220°C(15min)，8°C・min^{-1}　　气化室温度：200°C

载　气：He，40ml・min^{-1}　　检测器温度：250°C

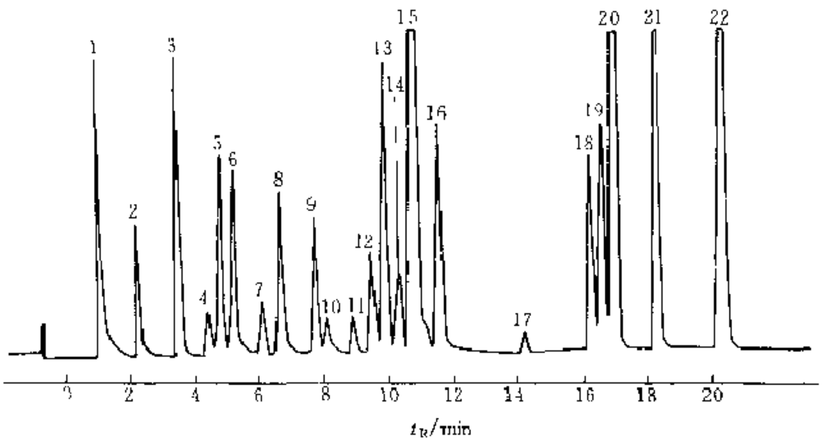


图 32-104　污水中有机污染物（二）[19]

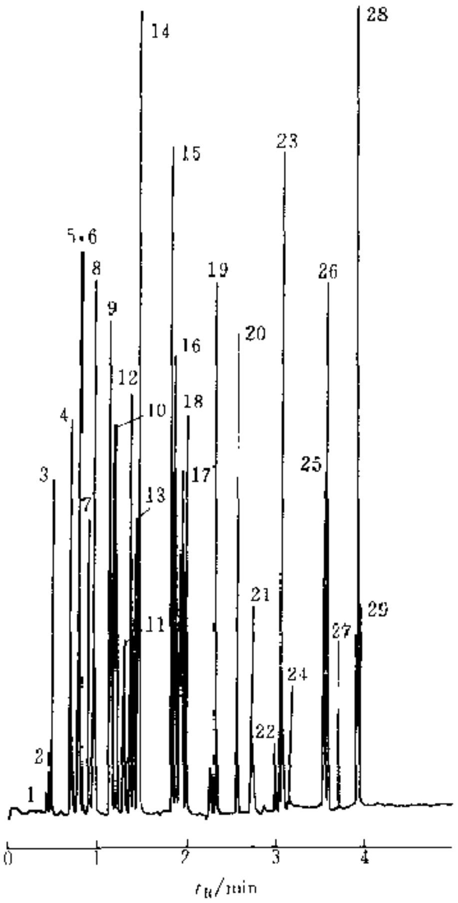
色谱峰：1—甲醇；2—二氯甲烷；3—1,1-二氯乙烯；4—溴氯甲烷；5—1,1-二氯乙烷；6—反-1,2-二氯乙烯；7—氯仿；8—1,2-二氯乙烷；9—1,1,1-三氯乙烷；10—四氯化碳；11—溴二氯甲烷；12—1-溴-2-氯甲烷；13—1,2-二氯丙烷；14—反-1,3-二氯丙烯；15—三氯乙烯＋苯；16—顺-1,3-二氯丙烯＋1,1,2-三氯乙烷＋氯二溴甲烷；17—溴仿；18—1,1,2,2-四氯乙烯＋1,1,2,2-四氯乙烷；19—1,4-二氯丁烷；20—甲苯；21—氯苯；22—乙基苯

色谱柱：0.2％ Carbowax 1500，Carbopack C(80 目～100 目)，2m×3mm

柱　温：6℃(3min)→160℃，8℃·min^{-1}

载　气：N_2，30ml·min^{-1}

检测器：FID



色谱峰：1—三氯一氟甲烷；2—1,1-二氯乙烯；3—反-1,2-二氯乙烯；4—1,1,1-三氯乙烷；5—四氯化碳；6—顺-1,2-二氯乙烯；7—二氯甲烷；8—苯；9—三氯乙烯；10—氯仿；11—一溴一氯甲烷；12—1,2-二氯乙烷；13—反-1,3-二氯丙烯；14—甲苯；15—四氯乙烯；16—顺-1,3-二氯丙烯；17—1-氯-2-溴丙烷；18—2-氯乙基乙烯基醚；19—一溴二氯甲烷；20—乙基苯；21—氯代苯；22—1,1,2-三氯乙烷；23—二溴一氯甲烷；24—1,4-二氯丁烷；25—溴仿；26—1,1,2,2-四氯乙烷；27—1,3-二氯苯；28—1,4-二氯苯；29—1,2-二氯苯

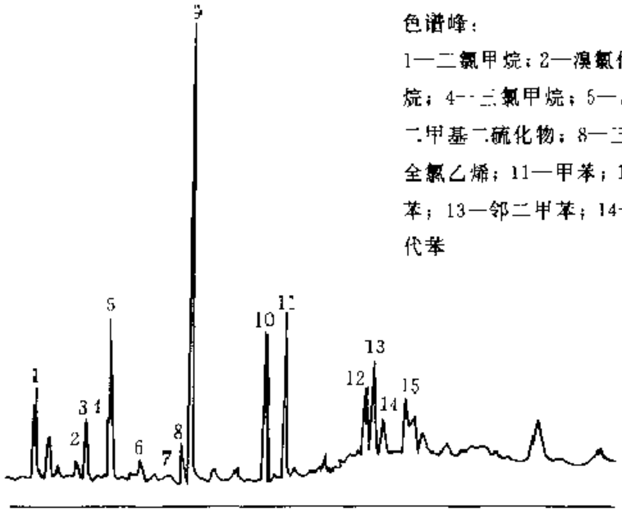
色谱柱：石墨化炭黑 Vulcan＋FFAP，9m×0.05mm

柱　温：30℃（1min）→200℃，30℃·min^{-1}

载　气：He，40cm·s^{-1}

检测器：FID

图 32-105　污水中有机污染物（三）[60]



色谱峰：

1—二氯甲烷；2—溴氯代甲烷；3—1,1-二氯乙烷；4—三氯甲烷；5—乙醚；6—环己烷；7—二甲基二硫化物；8—三氯乙烯；9—苯；10—全氯乙烯；11—甲苯；12—间二甲苯+对二甲苯；13—邻二甲苯；14—氯代甲苯；15—二氯代苯

图 32-106 污水中有机污染物（四）[71]

色谱柱：0.1% SP-1000，Carbopack C(80 目～100 目)，3m×3.2mm

柱　温：40℃ (3min) →225℃，8℃ · min^{-1}

载　气：N_2，20ml · min^{-1}

检测器：FID

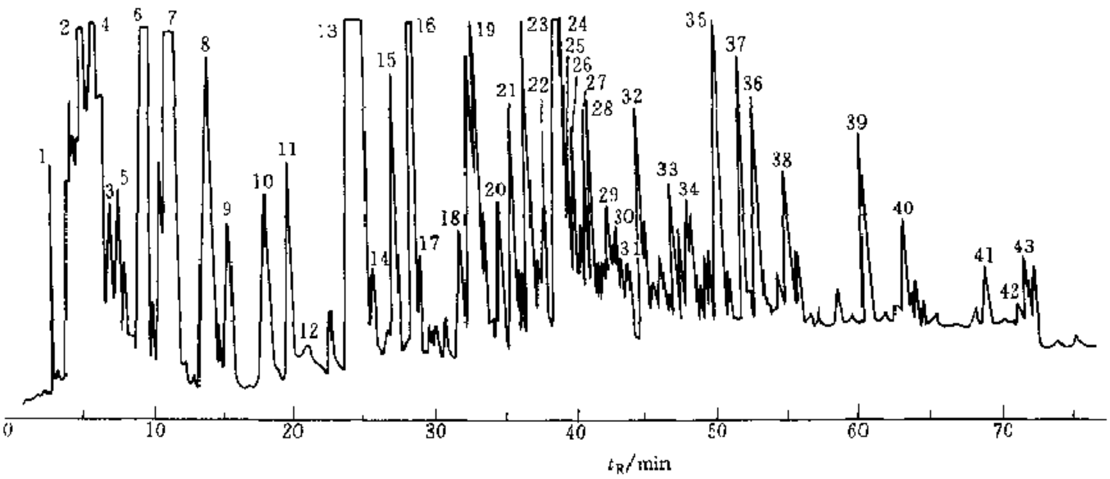


图 32-107 水中常见卤代烃与芳烃类污染物[72]

色谱峰：1—环戊二烯；2,3—二氯乙烯；4—二氯乙烷；5—氯仿；6—苯；7—三氯乙烯；8—氯苯；9—甲苯；10—四氯乙烯；11—三氯乙烷；12,13,15—二甲苯；14—蒎烯；16—苯乙烯；17,19,21—三甲苯；18—苯乙醛；20,22—乙基甲苯；23,26—二氯苯；24,25,27—二乙苯；28—茚+六氯乙烷；29,30—二甲基苯乙烯；31—二甲基乙苯；32—二甲基苯胺；33—硝基苯；34—甲基1H茚；35,36,38—三氯苯；37—萘；39,40—甲萘；41,42,43—二甲基萘

色谱柱：OV-17，45m×0.1mm

柱　温：室温(5min)→50℃(5min)→160℃，3℃ · min^{-1}

载　气：He，1ml · min^{-1}

检测器：MS

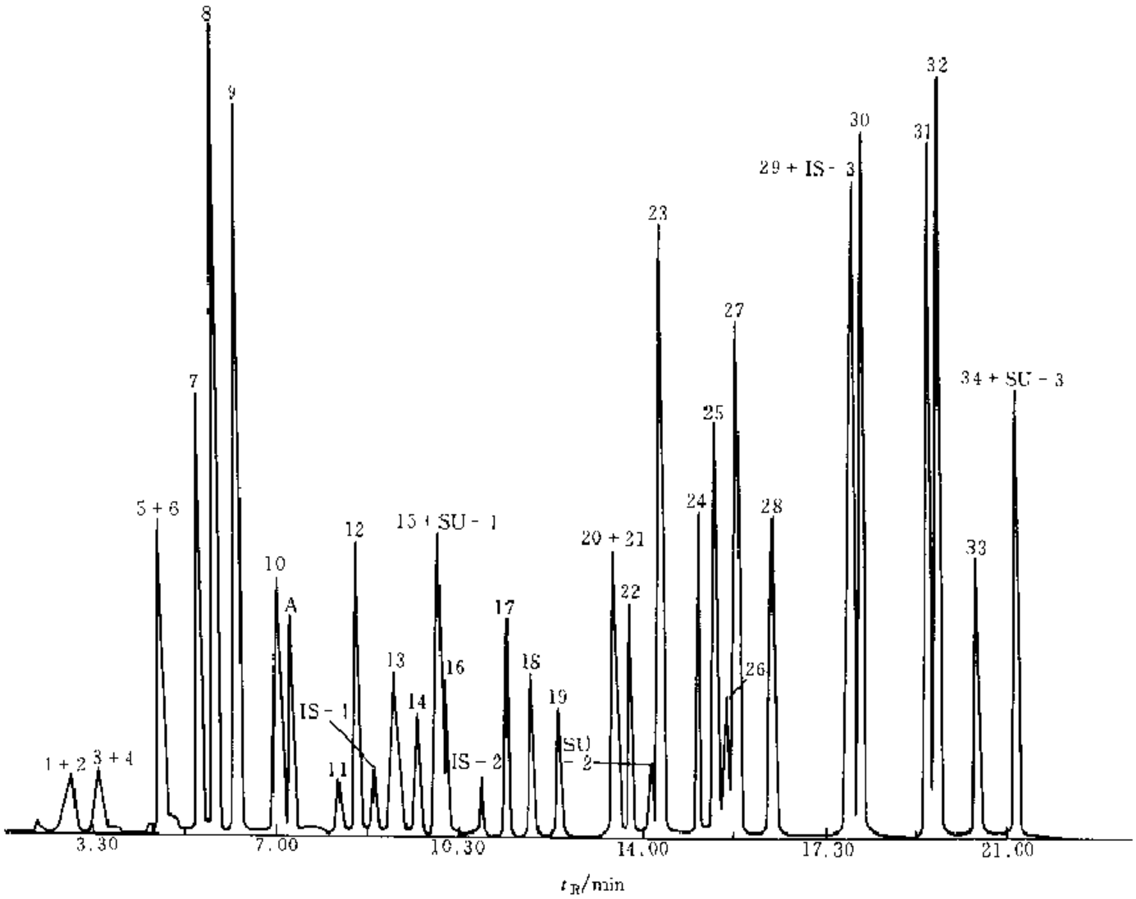


图 32-108 水中挥发性污染物

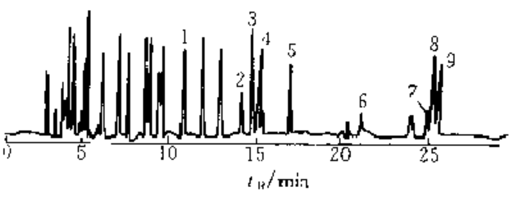
色谱峰：1- 氯甲烷；2—氯乙烯；3—溴甲烷；4 氯乙烷；5—1,1-二氯乙烯；6—丙酮；7—二硫化碳；8 二氯甲烷；9 反-1,2-二氯乙烯；10—1,1 二氯乙烷；11—2-丁酮；12—氯仿；13—1,1,1-三氯乙烷；14 四氯化碳；15—苯；16—1,2-二氯乙烷；17 三氯乙烯；18—1,2-二氯丙烷；19—溴二氯甲烷；20—2-氯乙基乙烯基醚；21—4-甲基-2 戊酮；22 顺-1,3-二氯丙烯；23—甲苯；24—反-1,3-二氯丙烯；25 1,1,2-三氯乙烷；26—2-己烷；27—四氯乙烯；28 一溴氯甲烷；29 氯苯；30—乙基苯；31—邻二甲苯；32 苯乙烯；33—溴仿；34—1,1,2,2 四氯乙烷；IS-1—溴氯甲烷；IS-2—1,4 二氟苯；IS-3—氯苯-d$_5$

A—乙酸乙烯基酯；SU 1—1,2-二氯乙烷；SU-2 -甲苯-c_8；SU 3—对溴氟苯

色谱柱：VOCOL，60m×0.75mm　　检测器：MS

柱　温：10℃(3min)→120℃(1min)，5℃·mn^{-1}　　气化室温度：250℃

载　气：He，10ml·min^{-1}



色谱峰：1—正辛烷；2 1,3-二氯-2-丙醇；3 1,2,3-三氯丙烷；4 2,3-二氯-1 丙醇；5 -2-乙基己醇；6—二氯丙基氯丙醇醚；7—四氯丙醚；8,9—峰 38 的同分异构体

图 32-109 水中有机污染物

色谱柱：SE 54，36m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱　温：35℃→240℃，5℃·min^{-1}

载　气：N_2

检测器：MS

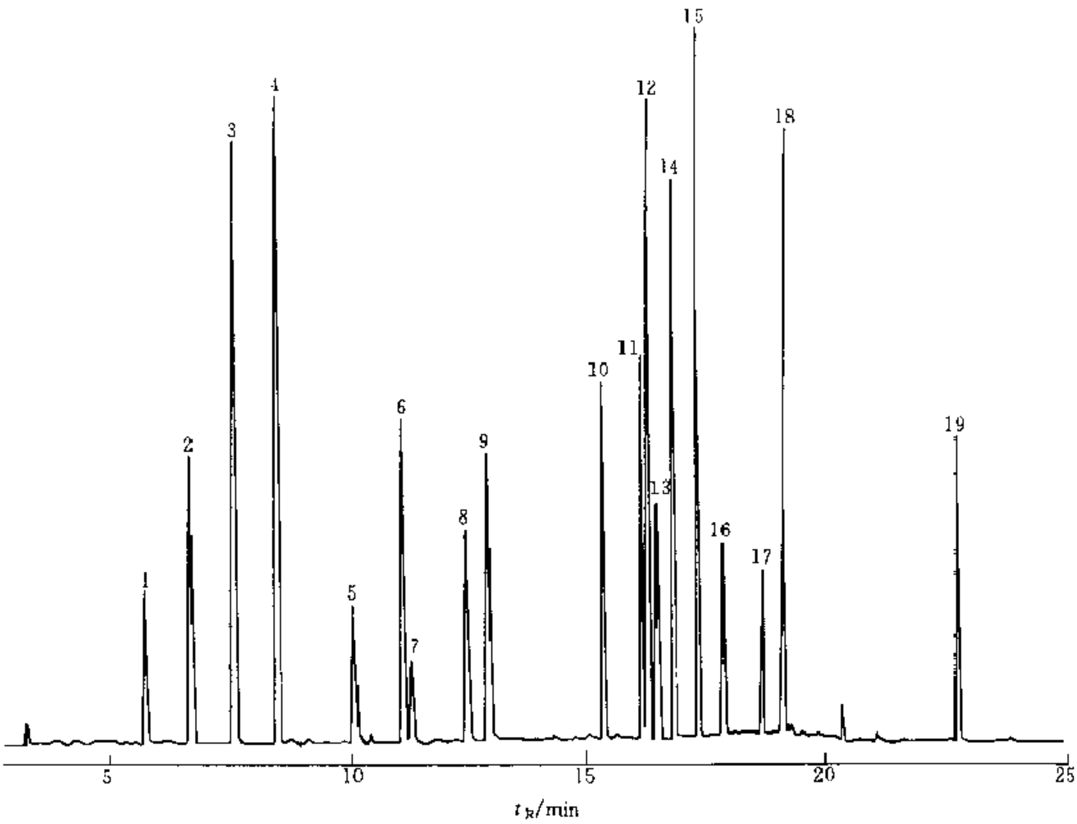


图 32-110 饮用水中氯化消毒副产品及溶剂——US EPA 方法 551[15]

色谱峰：1 氯仿；2—1,1,1-三氯乙烷；3 四氯化碳；4—三氯乙腈；5 二氯乙腈；6—一溴二氯甲烷；7—三氯乙烯；8—氯醛合水；9—1,1-二氯-2-丙酮；10—三氯硝基甲烷；11—二溴一氯甲烷；12—一溴一氯乙腈；13—1,2-二溴乙烷；14 四氯乙烯；15—1,1,1 三氯丙酮；16—1,2-二溴丙烷（内标）；17—溴仿；18—二溴乙腈；19 1,2-二溴 3 氯丙烷

色谱柱：DB 5ms，30m×0.25mm，d_f=1.0μm

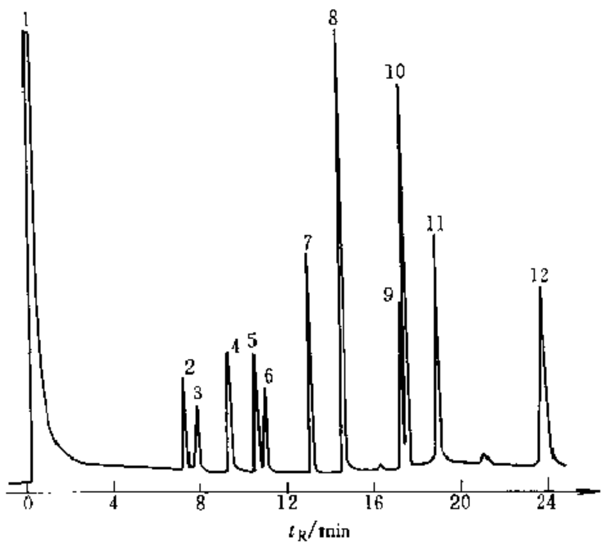
柱 温：35℃（9min）→40℃(3min)，10℃·min^{-1}→150℃（1min），15℃·min^{-1}

载 气：He

检测器：ECD

气化室温度：200℃

检测器温度：300℃



色谱峰：1—甲醇；2—邻氯酚；3—2-硝基酚；4—苯酚；5—2,4-二甲酚；6—2,4 二氯酚；7 2,4,6-三氯酚；8—4-氯-间-甲酚；9—2,4-二硝基酚；10—2,6-二硝基对甲酚；11—五氯酚；12—4-硝基酚

色谱柱：1%SP-1240-DA，Supelcoport（100 目～120 目），2m×2mm

柱 温：70℃(2min)→200℃，8℃·min^{-1}

载 气：He，30ml·min^{-1}

检测器：FID

检测器温度：250℃

图 32-111 废水中酚（一）——US EPA 方法 604[3]

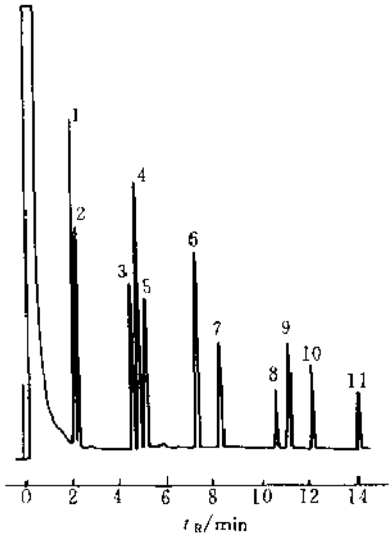


图 32-112 废水中酚（二）——US EPA 方法 604[8]

色谱峰：1—苯酚；2—氯酚；3—2-硝基酚；4—2,4-二甲酚；5—2,4-二氯酚；6—4-氯-3 甲酚；7—2,4,6-三氯酚；8—2,4-二硝基酚；9—4-硝基酚；10—2-甲基-4,6-二硝基酚；11—五氯酚

色谱柱：SPB 5，15m×0.53mm，d_f=1.5μm

柱　温：75℃(2min)→180℃(1min)，8℃·min^{-1}

载　气：He，15ml·min^{-1}　　气化室温度：250℃

检测器：FID　　检测器温度：250℃

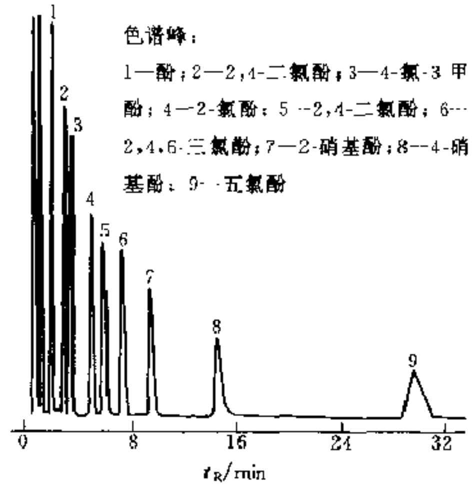


图 32-113 废水中酚（DFB 衍生物）—US EPA 方法 604[22]

色谱柱：5% OV 17，Chromosorb W AW-DMCS（80 目～100 目），1.8m×2mm

柱　温：200℃

载　气：5% CH_4+95%He，30ml·min^{-1}

检测器：ECD

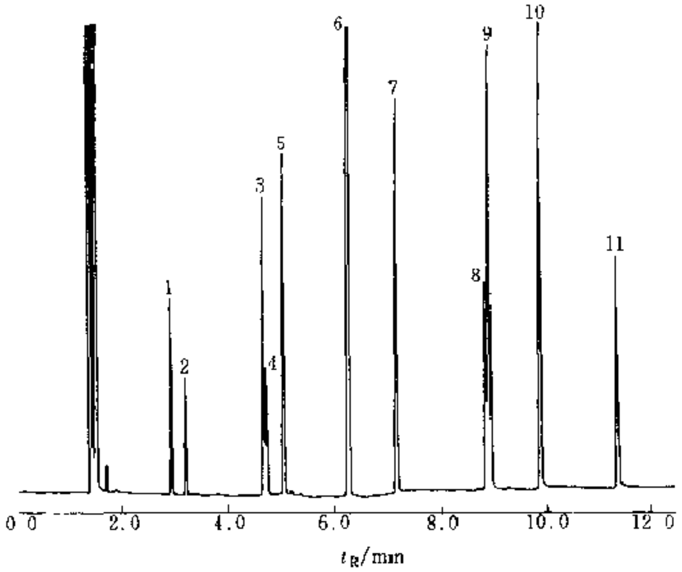


图 32-114 废水中酸性可萃取化合物 —US EPA 方法 625[26]

色谱峰：1—苯酚；2—2-氯酚；3—2,4-二甲酚；4—2-硝基酚；5—2,4-二氯酚；6—4-氯-3-甲基酚；7—2,4,6-三氯酚；8—2,4-二硝基酚；9—4-硝基酚；10—2-甲基-4,6-二硝基酚；11—五氯酚

色谱柱：BPX5，25m×0.32mm，d_f=0.5μm

柱　温：125℃→250℃(5min)，15℃·min^{-1}

检测器：FID

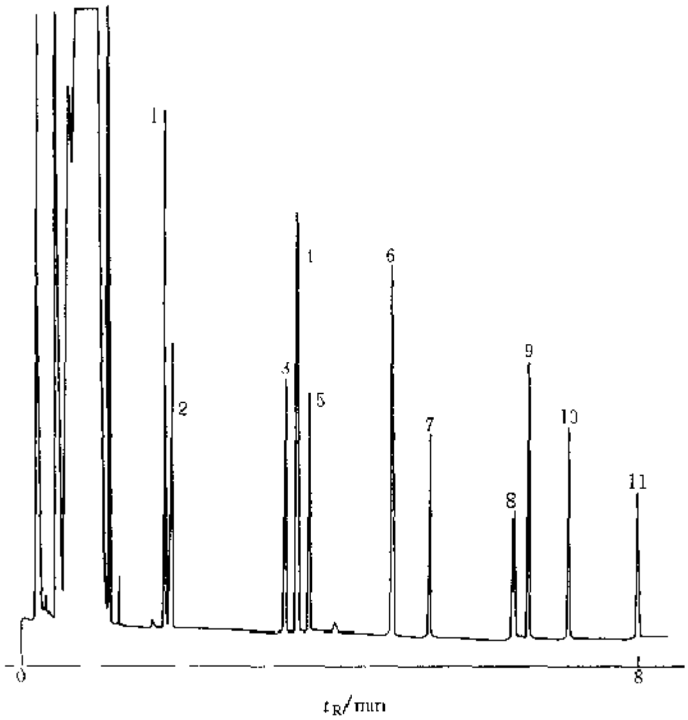


图 32-115　水中酚[57]

色谱峰：1—苯酚；2—2-氯苯酚；3—2-硝基苯酚；4—2,4-二甲基苯酚；5—2,4-二氯苯酚；6—对氯间甲酚；7—2,4,6-三氯苯酚；8—2,4-二硝基苯酚；9—4-硝基苯酚；10—4,6-二硝基邻甲酚；11—五氯苯酚

色谱柱：Ultra 2，25m×0.32mm，d_f=0.52μm

柱　温：40°C→70°C(1min)，30°C·min^{-1}→200°C(2min)，20°C·min^{-1}

检测器：FID

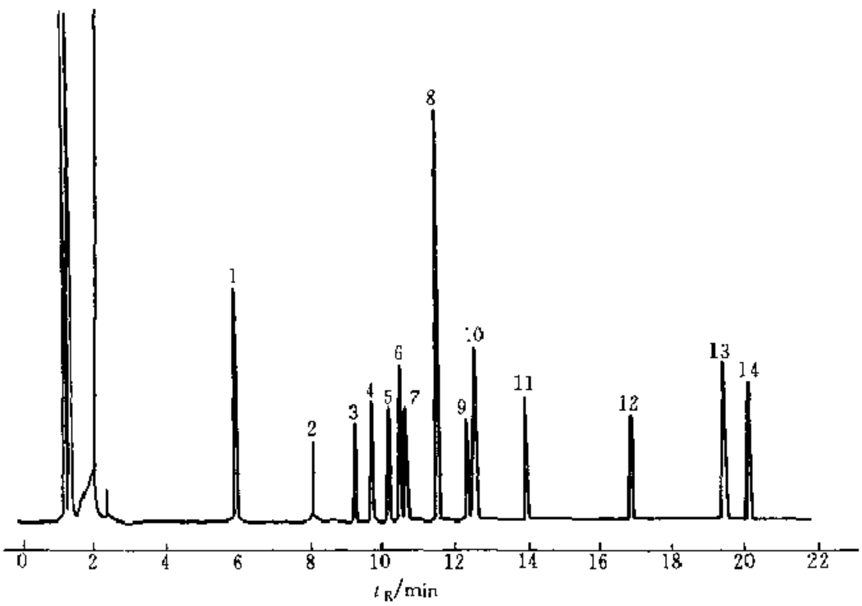


图 32-116　水中氯代硝基芳烃

色谱峰：1—硝基苯；2—2-硝基甲苯；3—3-硝基甲苯；4—4-硝基甲苯；5—1,3-氯硝基苯；6—1,4-氯硝基苯；7—1,2-氯硝基苯；8—1,1,2,2-四溴乙烷(内标物)；9—6-氯-2-硝基甲苯；10—4-氯-2-硝基甲苯；11—2-氯-4-硝基甲苯；12—2,6-二硝基甲苯；13—1-氯-2,4-二硝基苯；14—3,4-二硝基甲苯

色谱柱：DB-1，30m，d_f=0.25μm　　检测器：ECD

柱　温：80°C(5min)→280°C(5min)，5°C·min^{-1}　　气化室温度：280°C

载　气：He　　检测器温度：350°C

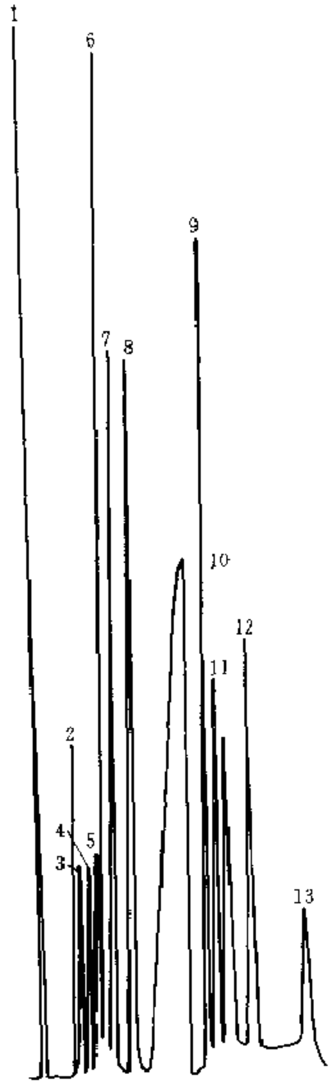


图 32-117　水中硝基苯类化合物[76]

色谱峰：1—苯；2—硝基苯；3—邻硝基甲苯；4—间硝基甲苯；5—对硝基甲苯；6—间硝基氯苯；7—对硝基氯苯；8—邻硝基氯苯；9—2,6-二硝基甲苯；10—2,5-二硝基甲苯；11—2,4-二硝基甲苯；12—2,4-二硝基氯苯；13—3,4-二硝基甲苯

色谱柱：5%FFAP，Chromosorb W HP（60目～80目），1.8m×2.5mm

柱　温：160℃(8min)→210℃(10min)，40℃·min⁻¹

载　气：N_2

检测器：ECD

检测器温度：250℃

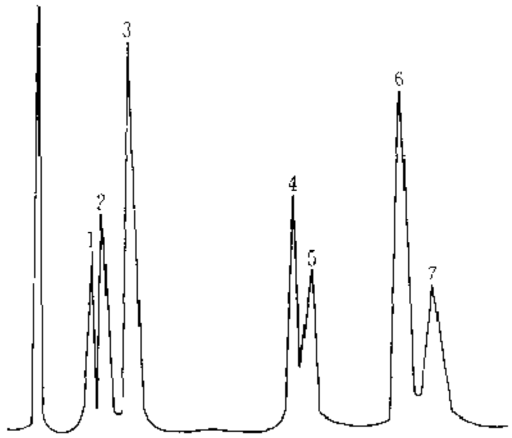


图 32-118　水源水中二硝基苯与硝基氯苯[75]

色谱峰：1—间硝基氯苯；2—对硝基氯苯；3—邻硝基氯苯；4—对二硝基苯；5—间二硝基苯；6—邻二硝基苯；7—2,4-二硝基苯

色谱柱：5%丁二酸二乙二醇聚酯，Chromosorb W(60目～80目)，2m×3mm

柱　温：160℃

检测器：ECD

气化室温度：200℃

检测器温度：200℃

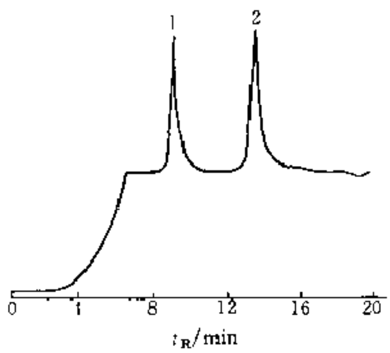


图 32-119　废水中丙烯醛和丙烯腈——US EPA 方法 603[22]

色谱峰：1—丙烯醛；2—丙烯腈

色谱柱：Carbowax 400，Porasil C(100目～120目)，1.8m×2.5mm

柱　温：45℃（2min）→85℃(12min)，8℃·min⁻¹

载　气：He，30ml·min⁻¹

检测器：火焰离子检测器

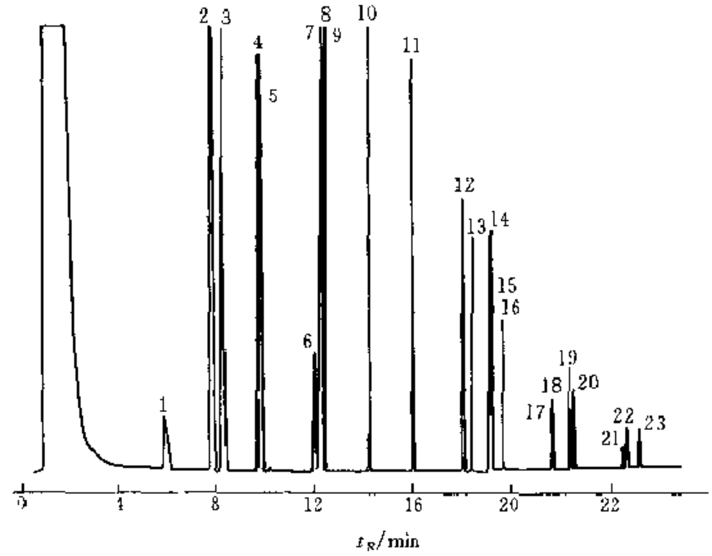


图 32-120　饮用水中半挥发有机化合物——US EPA 方法 525[8]

色谱峰：1—六氯环戊二烯；2—邻苯二甲酸二甲酯；3—苊-d_{10}；4—苊；5—邻苯二甲酸二乙酯；6—五氯酚；7—菲；8—菲-d_{10}；9—蒽；10—邻苯二甲酸二正丁酯；11—芘；12—邻苯二甲酸丁基苯基酯；13—双（2-乙基己基）己二酸酯；14—苯并［a］蒽；15—䓛；16—苯并［a］芘；17—邻苯二甲酸双（2-乙基己基）酯；18—苯并［b］荧蒽；19—苯并［k］荧蒽；20—苝-c_{12}；21—茚并［1，2，3 cd］芘；22—二苯并［a，h］蒽；23—苯并［ghi］苝

色谱柱：PTE 5，30m×0.25mm，d_f=0.25μm　　检测器：FID

柱　温：120℃（4min）→320℃，10℃·min^{-1}　　检测器温度：350℃

载　气：He，40cm·s^{-1}

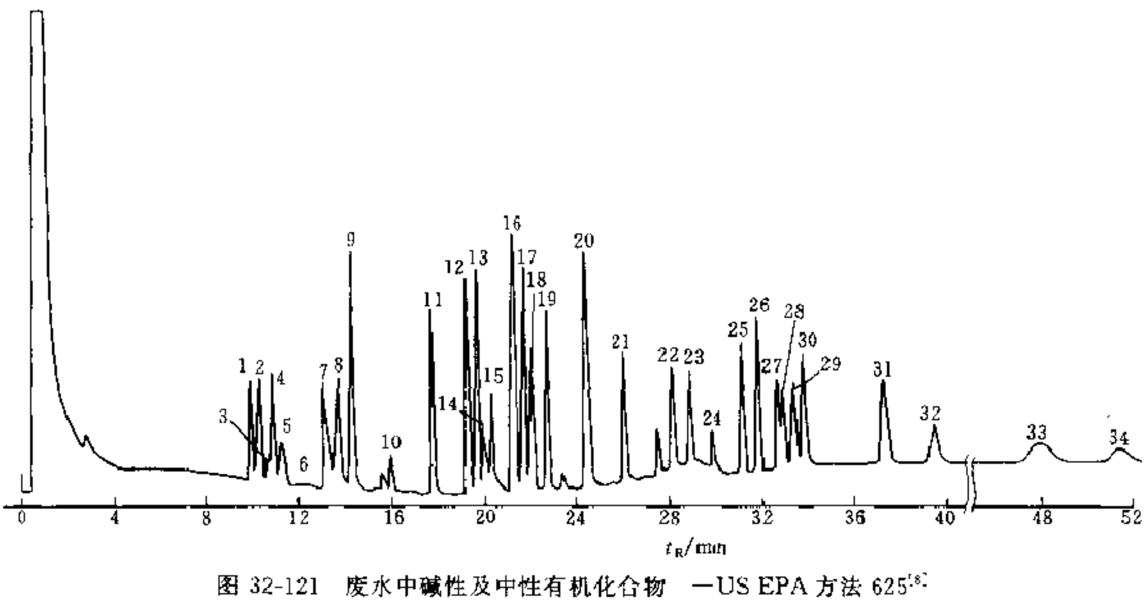


图 32-121　废水中碱性及中性有机化合物—US EPA 方法 625[8]

色谱峰：1—1,3-二氯苯；2—1,4-二氯苯-d_4；3—双(2-氯乙基)醚；4—六氯乙烷+1,2-二氯苯；5—双(甲基-2-氯乙基)醚；6—N-亚硝基二正丙胺；7—硝基苯+六氯丁二烯；8—1,2,4-三氯苯+异佛尔酮；9—萘+双(2-氯乙氧基)甲烷；10—六氯环戊二烯；11—2-氯萘；12—苊烯；13—苊；14—邻苯二甲酸二甲酯；15—2,6-二硝基甲苯；16—芴+4-氯苯基苯基醚；17—2,4二硝基甲苯；18—邻苯二甲酸二乙酯+N-亚硝基二苯胺；19—4-溴苯基苯基醚+六氯苯；20—菲+蒽；21—邻苯二甲酸二正丁酯；22—荧蒽；23—芘；24—联苯胺；25—丁基苯基苯二甲酸酯；26—苯二甲酸双(2-乙基己基)酯；27—苯并[a]蒽；28—䓛；29—3,3′-二氯联苯胺；30—邻苯二甲酸二正辛酯；31—苯并［b］荧蒽+苯并［k］荧蒽；32—苯并［a］芘；33—茚并[1,2,3-cd]芘+二苯并[a,h]蒽；34—苯并[ghi]苝

色谱柱：3% SP-2250，Supelcoport(100 目～120 目)，2m×2mm　　载　气：N_2，30ml·min^{-1}

检测器：FID

柱　温：50℃(4min)→270℃，8℃·min^{-1}　　检测器温度：300℃

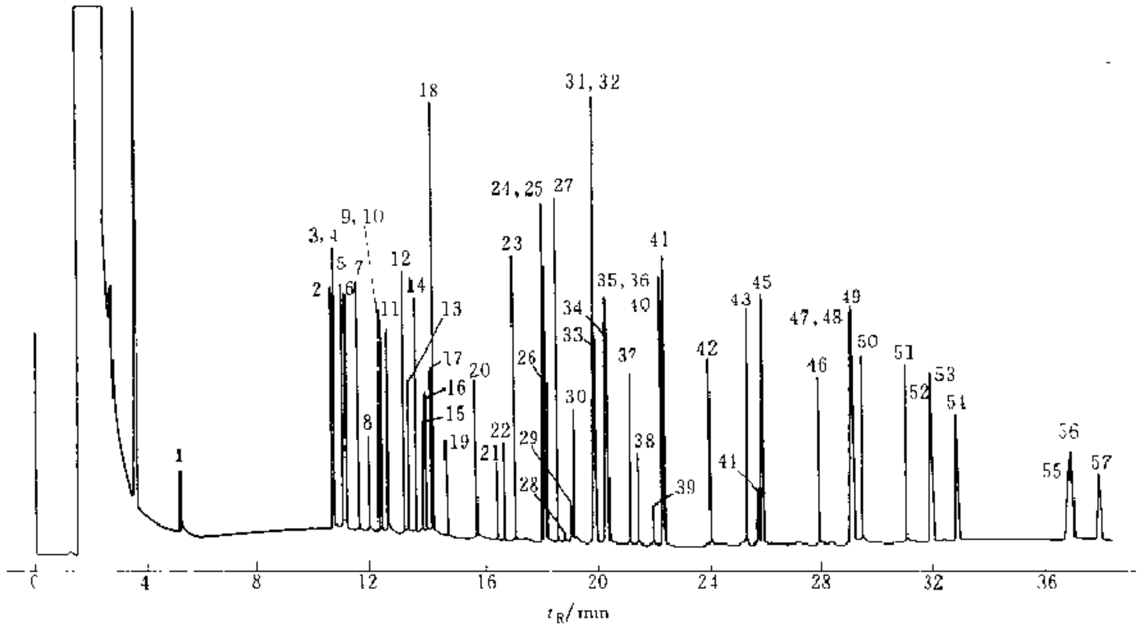


图 32-122　水中碱性及中性物质

色谱峰：1—N-亚硝基二甲基胺；2—苯酚；3—2-氯苯酚；4—双（2-氯乙基）醚；5—1,3-二氯苯；6—1,4-二氯苯；7—1,2-二氯苯；8—双（2-氯异丙基）醚；9—六氯乙烷；10—N-亚硝基-二-N-丙基胺；11—硝基苯；12—异佛尔酮；13—2-硝基苯酚；14—2,4-二甲基苯酚；15—双（2-氯乙氧基）甲烷；16—2,4-二氯苯酚；17—1,2,4-三氯苯；18—萘；19—己氯丁二烯；20—对氯间甲酚；21—己氯环内二烯；22—2,4,6-三氯苯酚；23—2-二氯萘；24—苊烯；25—苯二甲酸二甲酯；26—2,6-二硝基甲苯；27—苊；28—2,4-二硝基苯酚；29—4-硝基苯酚；30—2,4-二硝基甲苯；31—苯二甲酸二乙酯；32—芴；33—4-氯苯基苯基醚；34—4,6-二硝基邻甲酚；35—N-亚硝基二苯胺；36—1,2-二苯基肼；37—4-溴苯基苯基醚；38—六氯苯；39—五氯苯酚；40—菲；41—蒽；42—苯二甲酸二正丁酯；43—荧蒽；44—联苯胺；45—芘；46—苯二甲酸苯基丁酯；47—苯并[a]蒽；48—3,3'-二氯联苯胺；49—䓛；50—苯二甲酸双（2-乙基己基）酯；51—苯二甲酸二正辛酯；52—苯并[b]荧蒽；53—苯并[k]荧蒽；54—苯并[a]芘；55—茚并[1,2,3-cd]芘；56—二苯并[a,h]蒽；57—苯并[ghi]苝

色谱柱：SPB-5，30m×0.25mm，d_f=0.25μm　　载　气：He，25cm·s^{-1}

柱　温：30℃（4min）→300℃，10℃·min^{-1}　　检测器：FID

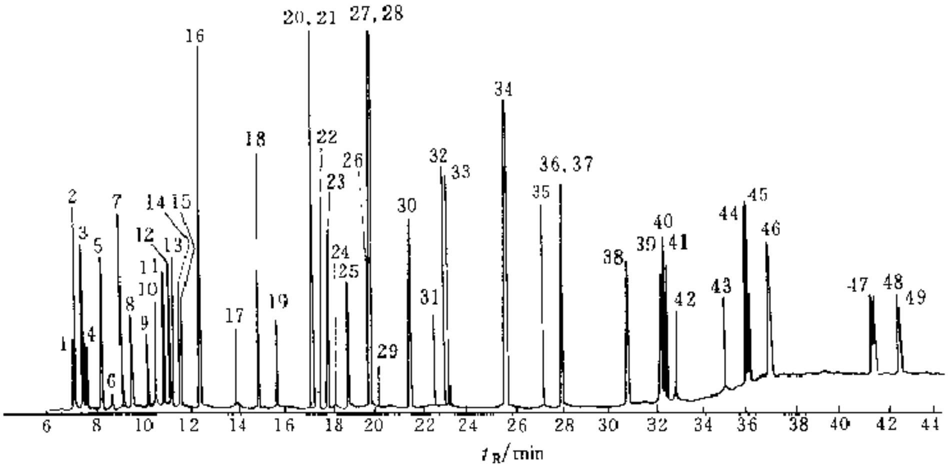


图 32-123　废水中半挥发性有机化合物　　US EPA1625[26]

色谱峰：1—2-氯酚；2—双（2-氯乙基）醚；3—1,3-二氯苯；4—1,4-二氯苯；5—1,2-二氯苯；6—双（2-氯异丙基）醚；7—六氯乙烯；8—硝基苯；9—异佛尔酮；10—2-硝基酚；11—2,4-二甲酚；12—双（2-氯乙氧基）甲烷；13—2,4-二氯苯；14—1,2,4-三甲苯；15—萘；16—六氯丁二烯；17—对氯间甲酚；18—六氯戊二烯；19—2-氯萘；20—邻苯二甲酸二甲酯；21—苊烯；22—3,6-二硝基甲苯；23—苊；24—2,4-二硝基酚；25—4-硝基酚；26—芴；27—邻苯二甲酸二乙酯；28—4-氯苯基苯基醚；29—2-甲基-4,6-二硝基酚；30—4-溴苯基苯基醚；31—五氯酚；32—菲；33—蒽；34—邻苯二甲酸二正丁酯；35—荧蒽；36—芘；37—联苯胺；38—邻苯二甲酸丁基苯基酯；39—䓛；40—3,3-二氯联苯胺；41—苯并[a]蒽；42—邻苯二甲酸双（2-乙基己基）酯；43—邻苯二甲酸二正辛酯；44—苯并[b]荧蒽；45—苯并[k]荧蒽；46—苯并[a]芘；47—茚并[1,2,3-cd]芘；48—二苯并[a,h]蒽；49—苯并[ghi]苝

色谱柱：BPX625，25m×0.22mm，d_f=0.25μm　　柱　温：50℃(2min)→290℃（10min），7℃·min^{-1}　　检测器：MS

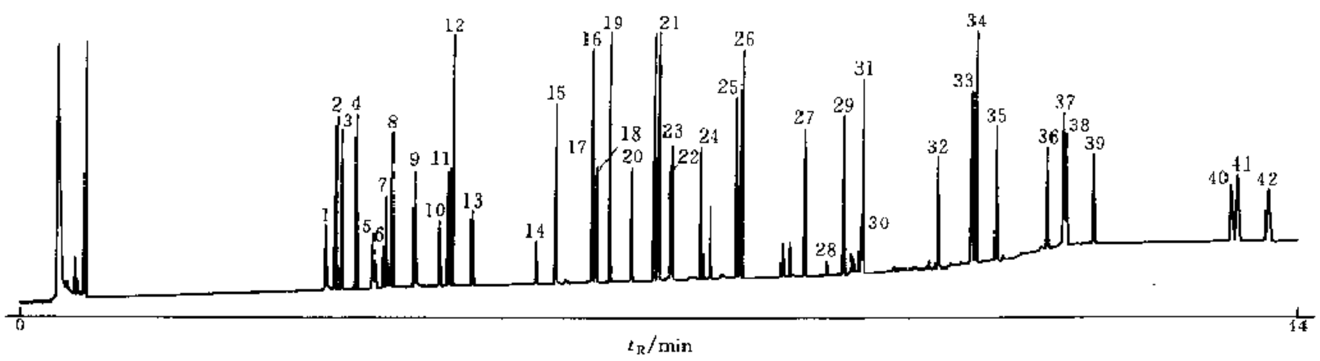


图 32-124 废水中碱性与中性抽提物 US EPA 方法 1625[77]

色谱峰：1—双（2-氯乙基）醚；2—1,3-二氯苯；3—1,4-二氯苯；4—1,2-二氯苯；5—双（2-氯异丙基）醚；6—六氯乙烷；7—*N*-亚硝基-二正丙基胺；8—硝基苯；9—异佛尔酮；10—双（2-氯乙氧烷）甲烷；11—1,2,4-三氯苯；12—萘；13—六氯丁二烯；14—六氯戊二烯；15—2-氯萘；16—苊烯；17—邻苯二甲酸二甲酯；18—2,6-二硝基甲苯；19—苊；20—芴；21—4-氯苯基苯基醚＋邻苯二甲酸二乙酯；22—2,4-二硝基甲苯；23—*N*-亚硝基二苯基胺；24—4-溴苯基苯基醚；25—菲；26—蒽；27—邻苯二甲酸二正丁酯；28—芘；29—荧蒽；30—联苯胺；31—䓛；32—邻苯二甲酸丁基苄基酯；33—苯并［*a*］蒽；34—3,3′-二氯联苯胺；35—邻苯二甲酸双（2-乙基己基）酯；36—邻苯二甲酸二正辛酯；37—苯并［*b*］荧蒽；38—苯并［*k*］荧蒽；39—苯并［*a*］芘；40—茚并[1,2,3-*cd*]芘；41—二苯并[*a*,*h*]蒽；42—苯并［*ghi*］苝

色谱柱：DB-5，30m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱　温：35℃(5min)→280℃，8℃·min^{-1}→280℃(20min)

载　气：H_2，53.7cm·s^{-1}

检测器：FID

气化室温度：275℃

检测器温度：300℃

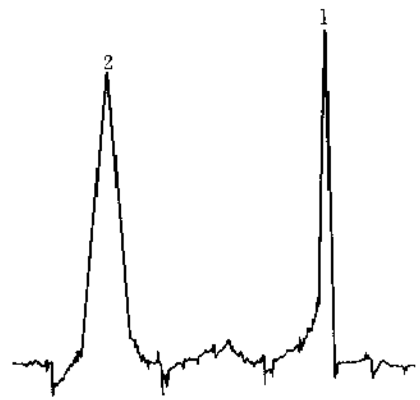


图 32-125 水源水中巴豆醛[78]

色谱峰：1—巴豆醛；2—异戊醇

色谱柱：15%Carbowax 4000，102 载体（60 目～80 目），2m×4mm

柱　温：80℃

载　气：N_2，45ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：140℃

检测器温度：140℃

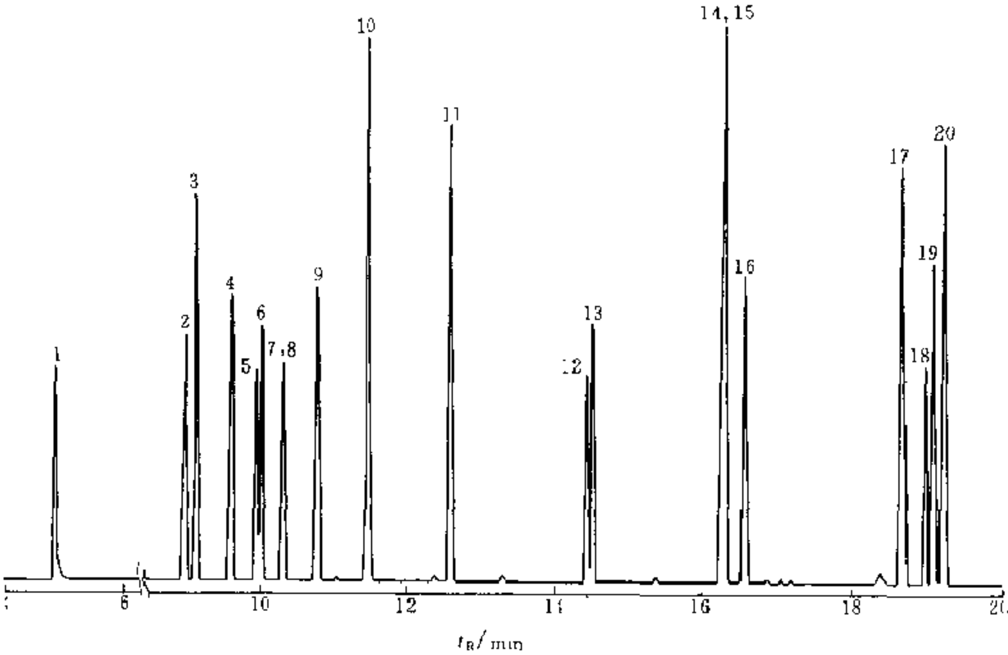


图 32-126　废水中半挥发性有机化合物——US EPA 方法 1312[35]

色谱峰：1—吡啶；2—双-2-氯乙基醚；3—2 氯酚；4—1,4-二氯苯；5—1,2-二氯苯；6—邻二甲酚；7—间二甲酚；8—对二甲酚；9—硝基苯；10—2,4 二甲酚；11—六氯丁二烯；12—2,4,6-三氯酚；13—2,4,5 三氯酚；14—2,4-二硝基酚；15—蒽；16—2,4-二硝基甲苯；17—六氯苯；18—β 六六六；19—五氯酚；20—γ-六六六

色谱柱：DB 5.625，30m×0.25mm，d_f=0.5μm　　　检测器：MS

柱　温：40℃(1min)→280℃，12℃·min^{-1}　　　气化室温度：250℃

载　气：He

第三节　固体污物色谱图

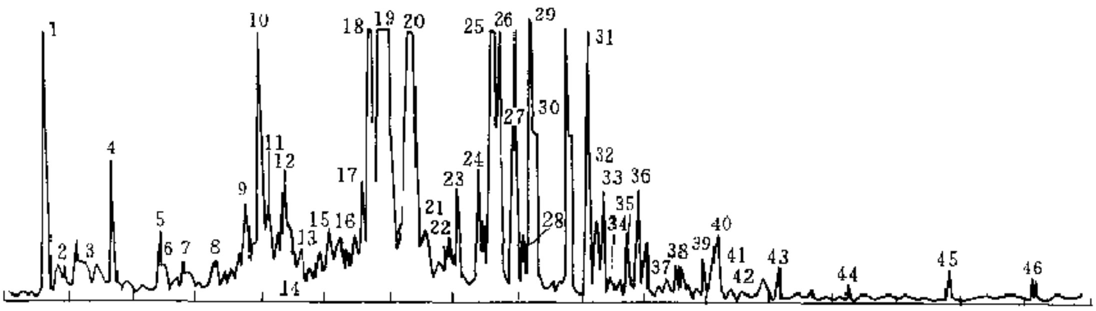


图 32-127　油田土样中的烃类[79]

色谱峰：1—二氧化碳；2—正丁烷；3—2,2-二甲基丁烷；4—正己烷；5—苯；6—3-甲基己烷；7—正庚烷；8—1,3 二甲基环戊烷；9—2,5-二甲基己烷；10—甲苯；11—1,3-二甲基环己烷；12—3-乙基己烷；13—1,2-二甲基环己烷；14—正辛烷；15—2,6-二甲基-3 庚烯；16—1-乙基-3-甲基环戊烷；17—正壬烷；18—乙苯；19—对二甲苯；20—间二甲苯；21—1-乙基-2-甲基环己烷；22—异丙苯；23—4-孩烯；24—丙苯；25—对乙基甲苯；26—间三甲苯；27—邻乙基甲苯；28—正癸烷；29—1,2,4-三甲苯；30—叔丁苯；31—2,3-二氢茚；32—对丙基甲苯；33—对二乙苯；34—十氢萘；35—1-乙基-3,5-二甲苯；36—2-乙基 1,4-对二甲苯；37—1,2,3,5-四甲苯；38—1,2,3,4-四甲苯；39—2-甲基 2,3-二氢茚；40—1-甲基 2,3-二氢茚；41—1,2,3,4-四氢萘；42—正十三烷；43—萘；44—正十四烷；45—正十五烷；46—正十六烷

色谱柱：BP5，50m×0.22mm　　　检测器：离子阱

柱　温：50℃(1.67min)→220℃(1min)，6℃·min^{-1}　　　气化室温度：260℃

载　气：He，1.5ml·min^{-1}　　　进样方式：居里点裂解，358℃，10s

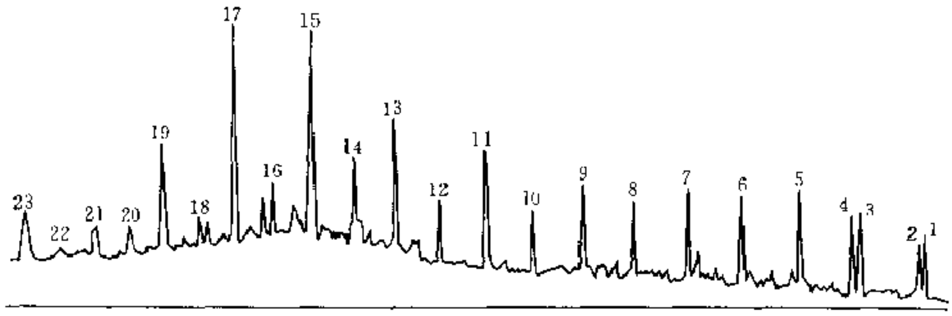


图 32-128 海洋沉淀物中的烷烃[85]

色谱峰：1—十七烷；2—姥鲛烷；3—十八烷；4—植烷；5—十九烷；6—二十烷；7—二十一烷；8—二十二烷；9—二十三烷；10—二十四烷；11—二十五烷；12—二十六烷；13—二十七烷；14—二十八烷；15—二十九烷；16—三十烷；17—三十一烷；18—三十二烷；19—三十三烷；20—三十四烷；21—三十五烷；22—三十六烷；23—三十七烷

色谱柱：SE-30，22m×0.29mm　　检测器：FID

柱　温：75℃→270℃，4.5℃·min⁻¹ 　　气化室温度：300℃

载　气：N_2　　检测器温度：290℃

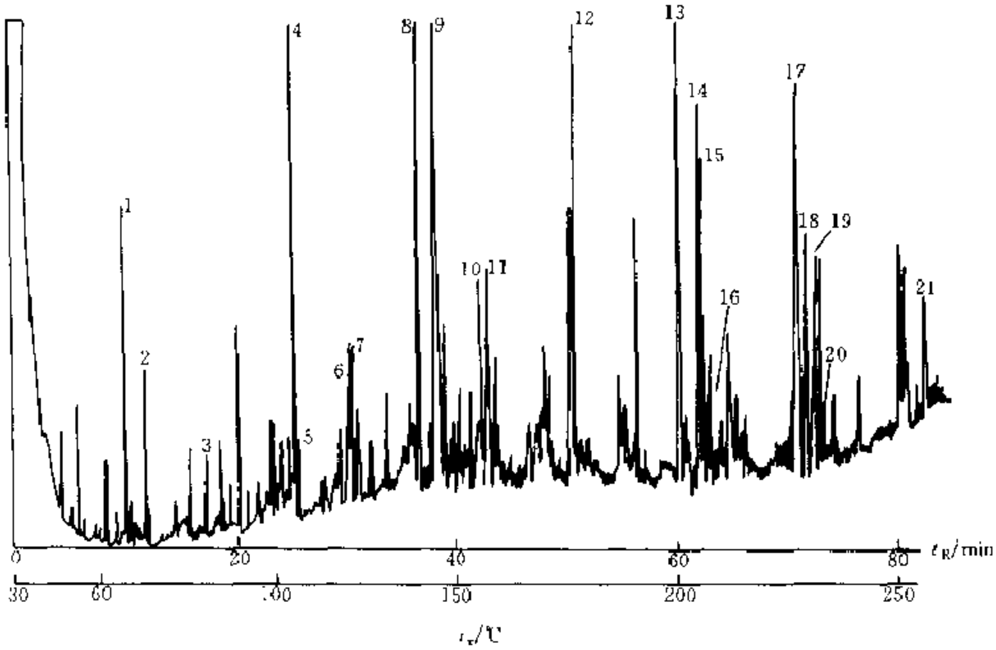


图 32-129 湖水沉淀物(一)[82]

色谱峰：1—联苯；2—苊烯；3—芴；4—菲；5—蒽；6—甲基菲；7—4,5-次甲基菲；8—荧蒽；9—芘；10—苯并［*a*］芴；11—苯并［*b*］芴；12—䓛或苯并［9，10］菲；13—苯并荧蒽；14—苯并［*e*］芘；15—苯并［*a*］芘；16—苝；17—二苯并蒽；18—茚并［1，2，3 *cd*］芘；19—苯并［*ghi*］苝；20—蒽；21—蔻

色谱柱：SE-52，20m×0.3mm　　载　气：H_2

柱　温：60℃→250℃，2℃·min⁻¹　　检测器：FID

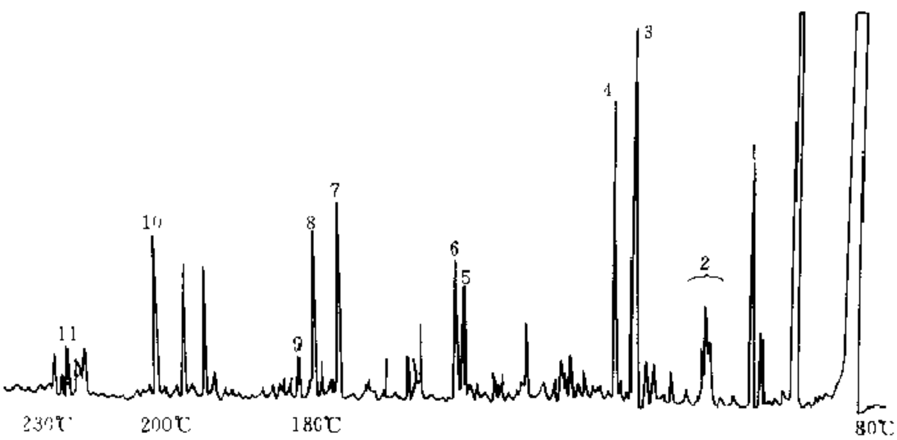


图 32-130 湖水沉淀物(二)[8]

色谱峰：1—菲；2—甲基菲+甲基蒽；3—荧蒽；4—芘；5—苯并蒽；6—䓛；7—苯并荧蒽；8—苯并芘；9—苝；10—苯并苝；11—晕苯

色谱柱：SE-52，13m×0.3mm　　载　气：H_2

柱　温：80°C→230°C，5°C·min⁻¹　　检测器：FID

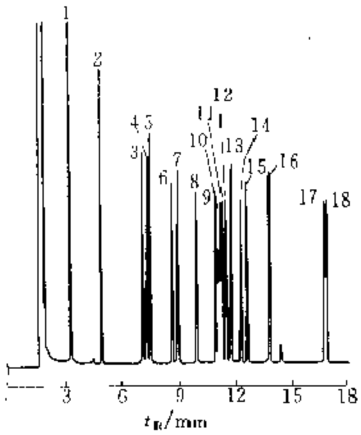


图 32-131 芳香族挥发性有机物——US EPA 方法 8020[32]

色谱峰：1—苯；2—甲苯；3—乙基苯；4—1,4-二甲苯；5—1,3-二甲苯；6—异丙基苯；7—1,2-二甲苯；8—正丙基苯；9—叔丁基苯；10—异丁基苯；11—1,2,3-三甲基苯；12—仲丁基苯；13—苯乙烯；14—1,4-异丙基苯；15—1,2,4-三甲基苯；16—正丁基苯；17—1,4-二异丙基苯；18—6-甲基苯乙烯

色谱柱：DB-WAX，30m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱　温：50°C(1min)→75°C，4°C·min⁻¹→100°C，10°C·min⁻¹

载　气：H_2，40cm·s⁻¹

检测器：FID

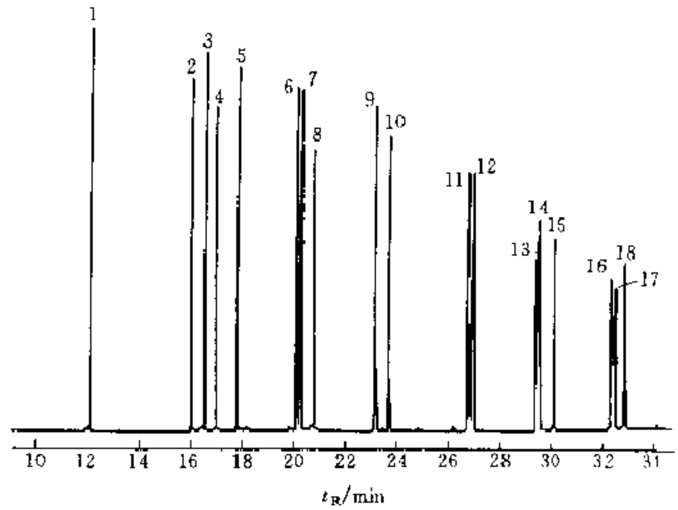


图 32-132 多环芳烃——US EPA 方法 8100[32]

色谱峰：1—萘；2—苊烯；3—苊；4—芴；5—氧芴；6—菲；7—蒽；8—咔唑；9—䓛；10—芘；11—苯并[a]蒽；12—䓛；13—苯并[b]荧蒽；14—苯并[k]荧蒽；15—苯并[a]芘；16—茚并[1,2,3-cd]芘；17—二苯并[a,h]蒽；18—苯并[ghi]苝（各25ng）

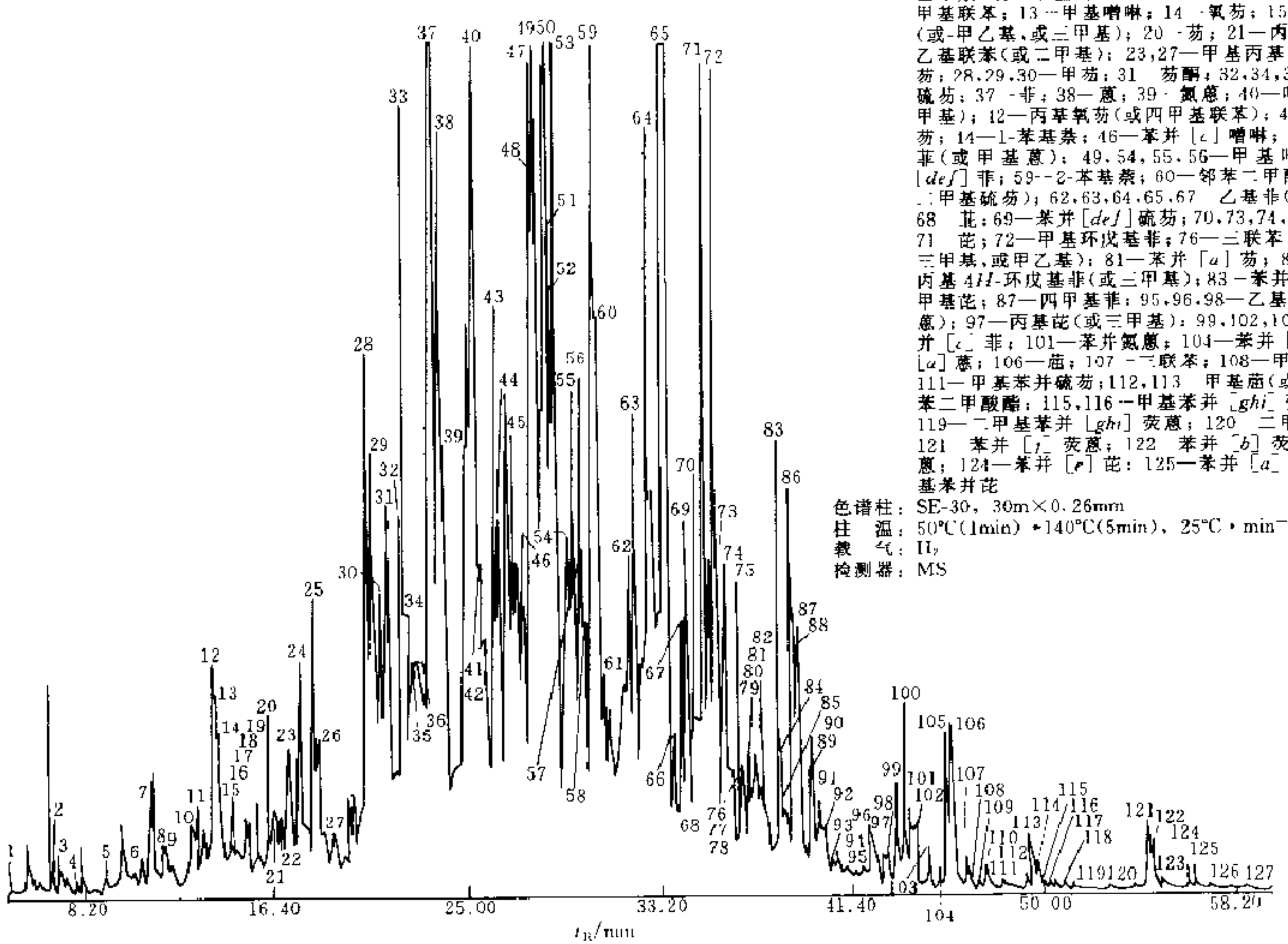
色谱柱：PTE-5，30m×0.32mm，d_f=0.25μm

柱　温：35°C(4min)→320°C，10°C·min⁻¹

载　气：He，40cm·s⁻¹

检测器：FID

检测器温度：350°C



色谱峰：1—萘；2—喹啉；3—异喹啉；4—甲基萘；5—甲基喹啉；6,8,12—乙基萘(或二甲基)；7,10—乙基喹啉(或二甲基)；9—苊烯；11—甲基联苯；13—甲基喹啉；14—氧芴；15,16,17,18,19—丙基萘(或甲乙基,或三甲基)；20—芴；21—丙基萘(或三甲基)；22—乙基联苯(或二甲基)；23,27—甲基丙基萘；24,25,26—甲基氧芴；28,29,30—甲芴；31—芴酮；32,34,35,36—乙基氧芴；33—硫芴；37—菲；38—蒽；39—氮蒽；40—咔唑；41—乙基芴(或二甲基)；42—丙基氧芴(或四甲基联苯)；43,45,57,58—甲基硫芴；44—1-苯基萘；46—苯并[c]喹啉；47,48,50,52,53—甲基菲(或甲基蒽)；49,54,55,56—甲基咔唑；51—4H-环戊基[def]菲；59—2-苯基萘；60—邻苯二甲酸酯；61—乙基硫芴(或二甲基硫芴)；62,63,64,65,67—乙基菲(或二甲基)；66—荧蒽；68—芘；69—苯并[def]硫芴；70,73,74,75,79—乙基环戊基菲；71—芘；72—甲基环戊基菲；76—三联苯；77,78,80—丙基菲(或三甲基,或甲乙基)；81—苯并[a]芴；82,84,85,89,92,93,94—丙基4H-环戊基菲(或三甲基)；83—苯并[b]芴；86,88,90,91—甲基芘；87—四甲基菲；95,96,98—乙基芘(或二甲基,或乙基荧蒽)；97—丙基芘(或三甲基)；99,102,103—苯并硫芴；100—苯并[c]菲；101—苯并氮蒽；104—苯并[ghi]荧蒽；105—苯并[a]蒽；106—䓛；107—三联苯；108—甲基苯并氮蒽；109,110,111—甲基苯并硫芴；112,113—甲基䓛(或甲基苯并蒽)；114—邻苯二甲酸酯；115,116—甲基苯并[ghi]荧蒽；117—联萘；118,119—二甲基苯并[ghi]荧蒽；120—二甲基苯并菲(或乙基䓛)；121—苯并[j]荧蒽；122—苯并[b]荧蒽；123—苯并[k]荧蒽；124—苯并[e]芘；125—苯并[a]芘；126—苝；127—甲基苯并芘

色谱柱：SE-30，30m×0.26mm

柱　温：50℃(1min)→140℃(5min)，25℃·min^{-1}→300℃，3℃·min^{-1}

载　气：H_2

检测器：MS

图 32-133　尘埃中多环芳烃（一）[84]

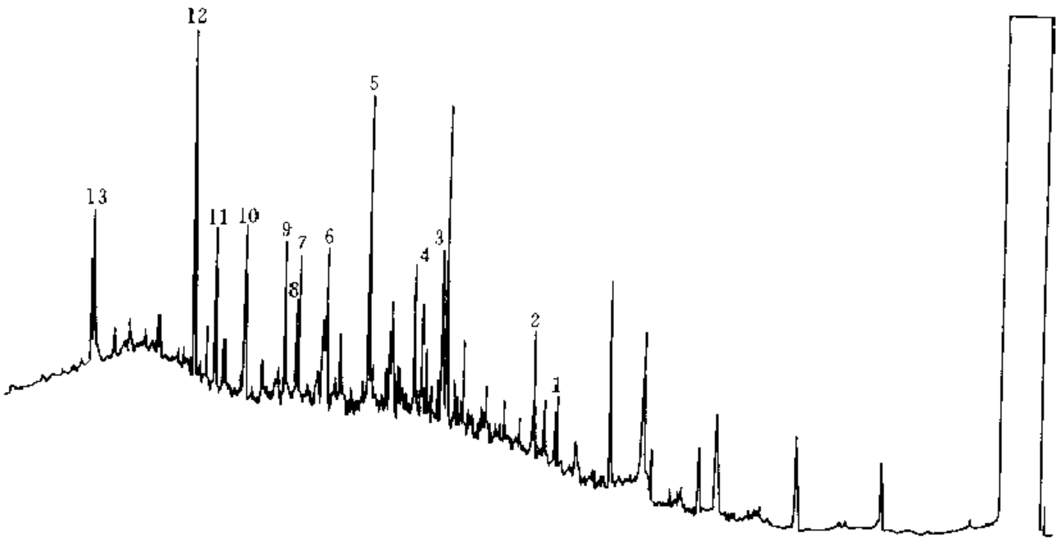


图 32-134　尘埃中多环芳烃(二)[65]

色谱峰：1—荧蒽；2—芘；3—苯并[*g*,*h*,*i*]荧蒽；4—环戊[*c*,*d*]芘+苯并[*a*]蒽+䓛；5—2,2-联萘(内标物)；6—苯并[*j*]荧蒽+苯并[*k*]荧蒽+苯并[*e*]荧蒽；7—苯并[*e*]芘；8—苯并[*a*]芘；9—6*H*-苯并[*c*,*d*]芘-6-酮；10—对四苯基；11—茚并[1,2,3-*cd*]芘；12—苯并[*ghi*]苝；13—晕苯

色谱柱：50%甲苯基甲基硅氧烷，10m　　检测器：FID

柱　温：70℃(1.5min)→305℃，7℃·min^{-1}　　进样方式：不分流，于70℃1.5min

载　气：H_2，60cm·s^{-1}

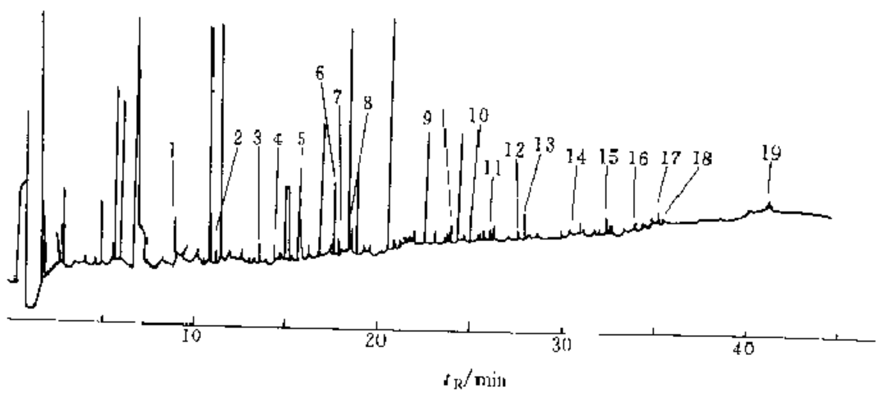


图 32-135　尘埃中硝基化合物[18]

色谱峰：1—邻乙基硝基苯；2—对乙基硝基苯；3—对二硝基苯；4—2,6-二硝基苯；5—2,4-二硝基苯；6—1-硝基-2-甲基萘；7—2,6-二硝基间二甲苯；8—3,5-二硝基邻二甲苯；9—1,5-二硝基萘；10—1,3-二硝基萘；11—5-硝基苊；12—2-硝基芴；13—9-硝基蒽；14—4,4′-二硝基联苯；15—2,5-二硝基芴；16—1-硝基芘；17—2,7-二硝基芴；18—4-硝基对三联苯；19—6-硝基䓛

色谱柱：5%苯基甲基硅氧烷，12.5m×0.2mm

柱　温：70℃→300℃，6℃·min^{-1}

检测器：FID

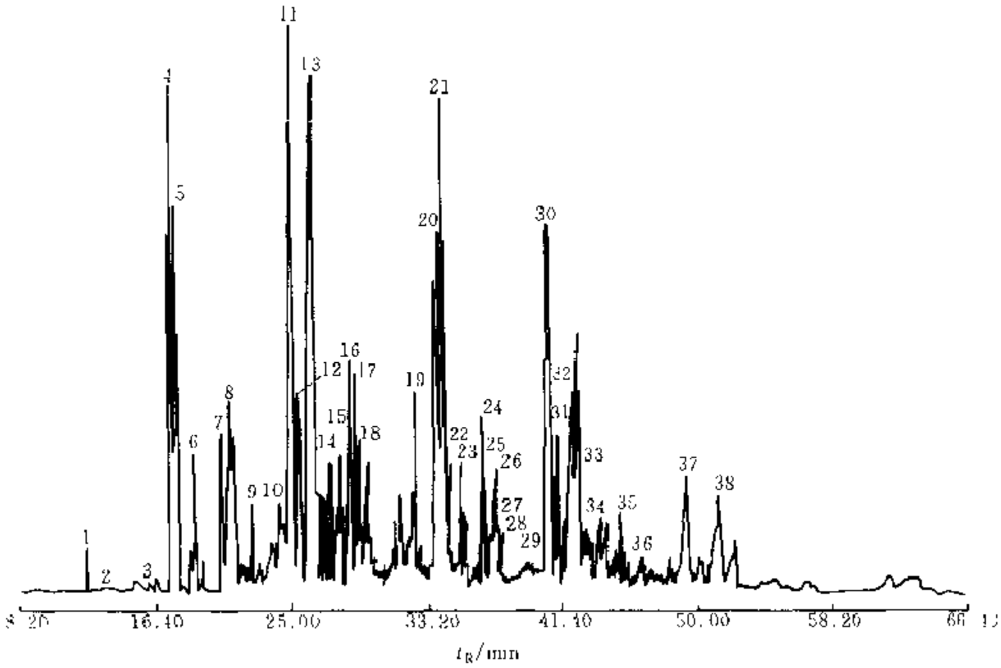
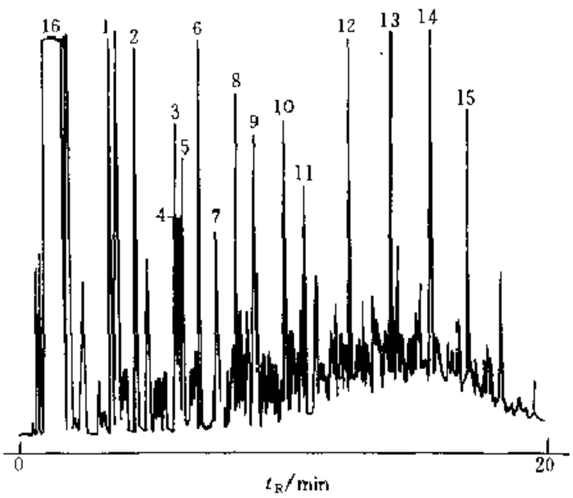


图 32-136 焦化厂悬浮颗粒中多环芳烃[85]

色谱峰：1—芴；2—4 甲基二苯并呋喃；3—甲基芴；4—菲；5—蒽；6—咔唑；7—甲基菲；8—4*H* 环戊 [*def*] 菲；9—苯基萘；10—二甲基菲；11—荧蒽；12—4,5-二氢芘；13—芘；14—2-氯二苯并 [*b*, *e*] 二噁烷；15—2 甲基芘；16—4-甲基芘；17—苯并 [*b*] 芴；18—1-甲基芘；19—苯并 [*c*] 菲；20—苯并 [*c*] 蒽；21—䓛；22—三亚苯；23—15*H*-环戊 [*a*] 菲；24—2 甲基三亚苯；25—甲基䓛；26—甲基苯并 [*a*] 蒽；27—2,2′-联二萘；28—二甲基苯并 [*a*] 蒽；29—二甲基苯并 [*c*] 菲；30—苯并 [*k*] 荧蒽；31—苯并 [*j*] 荧蒽；32—苯并 [*e*] 芘；33—苯并 [*e*] 芘；34—苝；35—胆蒽；36—1-二苯基亚甲基茚-1-氢；37—茚并 [1,2,3,-*cd*] 芘＋二苯并 [*a*, *h*] 蒽；38—二苯并 [*def*, *mno*] 䓛

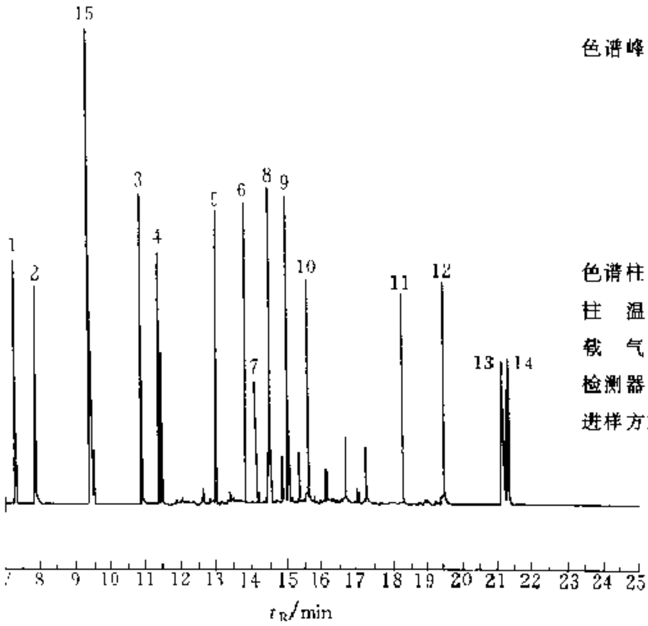
色谱柱：OV-101，25m×0.21mm
柱　温：170℃→290℃，4℃·min^{-1}
载　气：N_2，7ml·min^{-1}
检测器：FID
气化室温度：340℃
检测器温度：340℃



色谱峰：1—2 甲基己烷；2—正庚烷；3—甲苯；4—3-甲基庚烷；5—1,3-二甲基环己烷或 1,4-二甲基环己烷；6—正辛烷；7—四甲基环戊烷或三甲基环己烷；8—间二甲苯＋对二甲苯；9—正壬烷；10—三甲基辛烷；11—正癸烷；12—正十一烷；13—正十二烷；14—正十三烷；15—正十四烷；16—二氯甲烷(溶剂)

色谱柱：DB-5，15m×0.55mm，d_f=1.5μm
柱　温：10℃(3min)→225℃(2min)，10℃·min^{-1}
载　气：He，9ml·min^{-1} (45℃)
检测器：FID
气化室温度：300℃
检测器温度：300℃

图 32-137 泥土中的航空汽油[88]



色谱峰：1—$(CH_3)_3SnCl$；2—$(C_2H_5)_4Sn$；3—$(C_2H_5)_3SnBr$；4—$(CH_3)_2SnCl_2$；5—$(C_2H_5)_2SnCl_2$；6—$(C_4H_9)_4Sn$；7—CH_3SnCl_3；8—$(C_4H_9)_3SnCl$；9—$(C_4H_9)_2SnCl_2$；10—$C_4H_9SnCl_3$；11—$(C_6H_5)_2SnCl_2$；12—$(C_6H_5)_3SnCl$；13—$(C_6H_{11})_4Sn$；14—$(C_6H_5)_4Sn$；15—$(CH_3)_3C_6H_5Sn$（内标）

色谱柱：HP-5，25m×0.32mm，d_f=0.52μm

柱　温：55℃(5min)→260℃(10min)，15℃·min^{-1}

载　气：He，6ml·min^{-1}

检测器：原子发射检测器（Sn 波长，270.651nm）

进样方式：冷柱头进样

图 32-138　泥土中有机锡化合物(溴化戊基镁衍生物)[89]

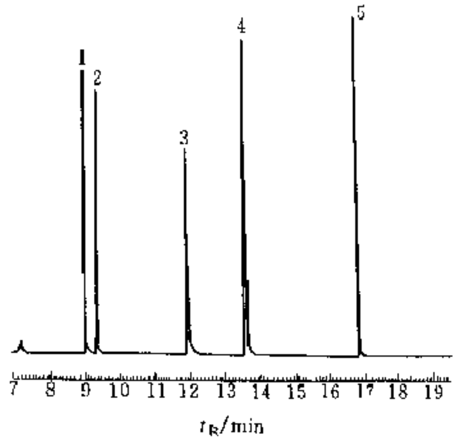


图 32-139　泥土中有机铅化合物（溴化戊基镁衍生物）[89]

色谱峰：1—$(CH_3)_3PbCl$；2—$(C_2H_5)_4Pb$；3—$(C_2H_5)_3PbCl$；4—$(C_4H_9)_3PbOOCCH_3$；5—$(C_5H_{11})_3PbOOCCH_3$

色谱柱：HP-5，25m×0.32mm，d_f=0.52μm

柱　温：55℃(5min)→260℃(10min)，15℃·min^{-1}

载　气：He，6ml·min^{-1}

检测器：原子发射检测器（Pb，波长 261.418nm）

进样方式：冷柱上进样

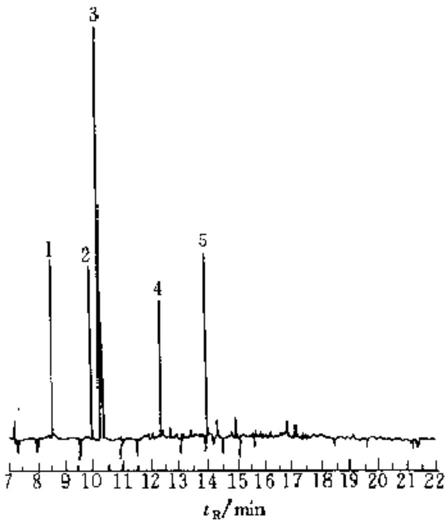


图 32-140　泥土中有机汞化合物（溴化戊基镁衍生物）[89]

色谱峰：1—CH_3HgCl；2—C_2H_5HgCl；3—$[(CH_3)_3SiCH_2]_2Hg$（内标）；4—$C_6H_5HgOOCCH_3$；5—$C_7H_{15}HgCl$

色谱柱：HP-5，25m×0.32mm，d_f=0.52μm

柱　温：55℃(5min)→260℃(10min)，15℃·min^{-1}

载　气：He，6ml·min^{-1}

检测器：原子发射检测器（Hg，波长 253.652nm）

进样方式：冷柱上进样

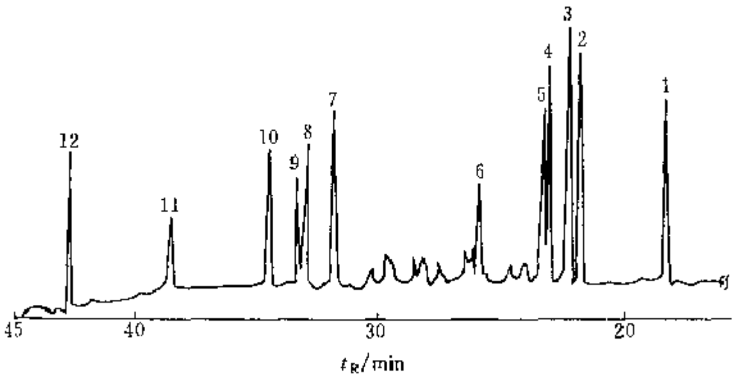


图 32-141 泥土中有机氯化物[90]

色谱峰：1—五氯苯；2—α-666；3—β-666；4—γ-666；5—δ-666；6—PCB；7—p,p'-DDE；8—p,p'-DDD；9—o,p'-DDT；10—p,p'-DDT；11—Aloclor 1260；12—十氯联苯

色谱柱：OV 101，12.5m×0.25mm　　检测器：ECD

柱　温：40℃→270℃，10℃·min⁻¹　　气化室温度：260℃

载　气：N_2，2ml·min⁻¹　　检测器温度：285℃

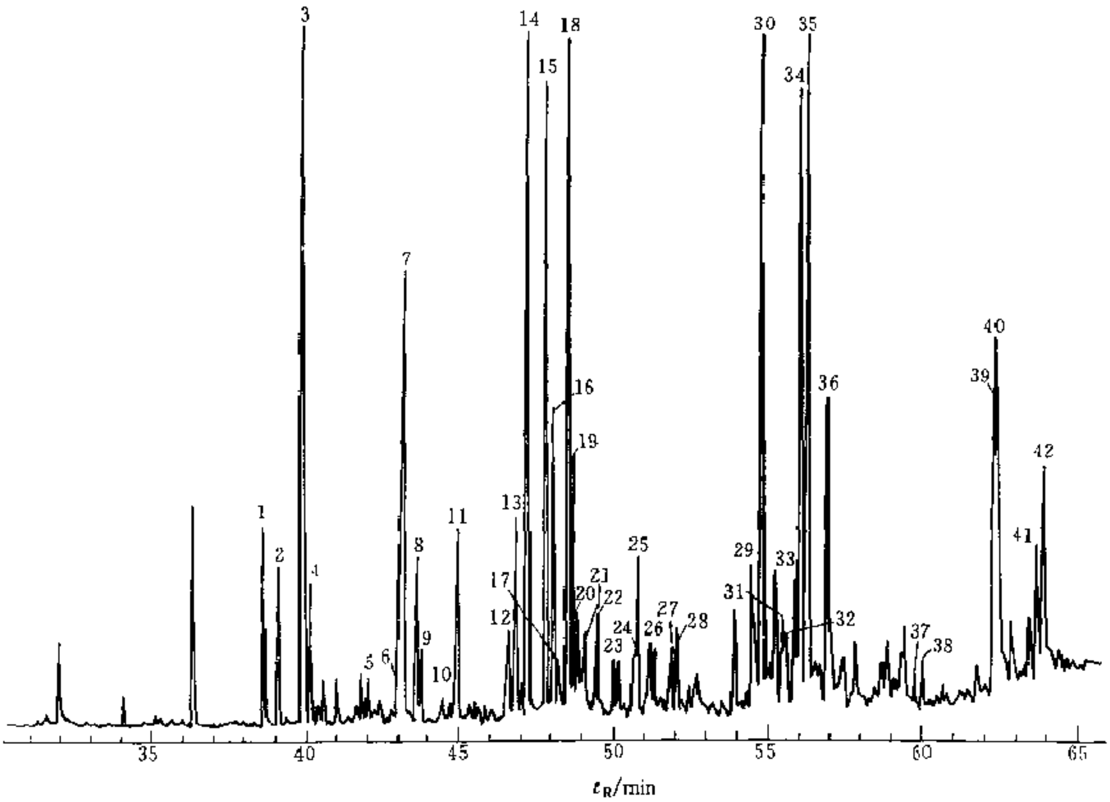


图 32-142 住宅褐煤燃烧炉的多环化合物[87]

色谱峰：1—芴-9-酮；2—硫芴；3—菲；4—蒽；5—咕吨酮；6—3-甲基菲；7—非那啉-1-酮；8—4H-环戊[def]菲；9—1-甲基菲；10—9,10蒽醌；11—2-苯基萘；12—萘-1,8-二羧酸酐；13—环戊[def]菲酮；14—荧蒽；15—乙酰亚菲；16—菲并[4,5-bcd]噻吩；17—蒽-9-腈；18—芘；19—苯并萘并呋喃；20—菲-9-羧基醛；21～23—苯并萘并呋喃异构体；24—苯并[a]芴；25—苯并[b]芴；26—4-甲基芘；27—2-甲基芘；28—1-甲基芘；29—苯并[b]萘并[2,1-d]噻吩；30—苯并[ghi]荧蒽；31—苯并[b]萘并[1,2-d]噻吩；32—苯并[b]萘并[2,3-d]噻吩；33—环戊[cd]芘；34—苯并[a]蒽；35—䓛；36—苯并蒽酮；37—2,1-联萘；38—2,2-联萘；39—苯并[b]荧蒽；40—苯并[k]荧蒽；41—苯并[e]芘；42—苯并[a]芘

色谱柱：SPB-5，30m×0.25mm，d_f=0.25μm　　检测器：MS

柱　温：40℃(2min)→300℃，4℃·min⁻¹　　进样方式：冷柱头进样

载　气：He

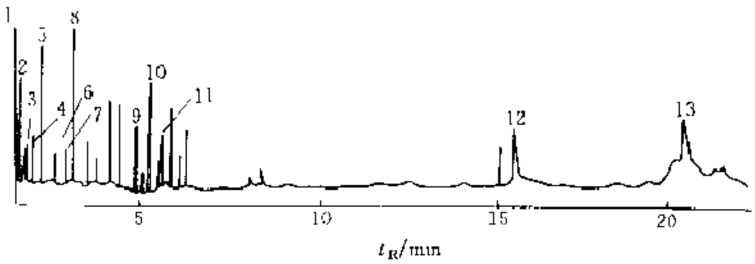


图 32-143　抽油烟机油烟凝聚物[91]

色谱峰：1—戊烷；2—己醛；3—2-庚烯醛；4—己酸；5—2，4-壬二烯醛；6—丁基环氧乙烷；7—2-壬烯醛；8—壬醛；9—2-癸烯醛；10—未知物；11—2，4-癸二烯醛；12—十六酸；13—十八酸

色谱柱：OV 101，25m×0.2mm，d_f=0.2μm　　检测器：MS

柱　温：100℃→200℃（5min）；5℃·min^{-1}　　气化室温度：240℃

载　气：He，100kPa

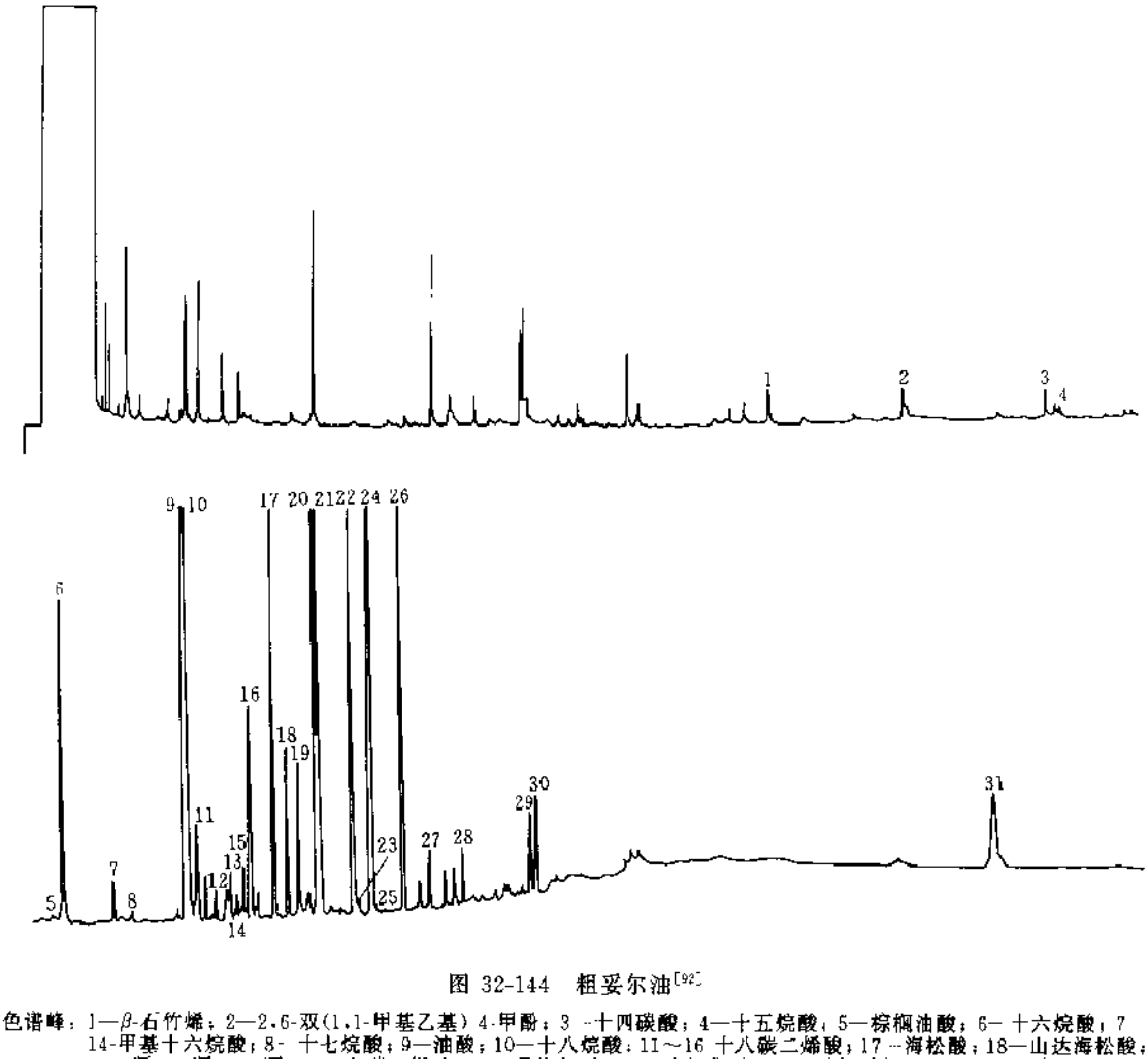


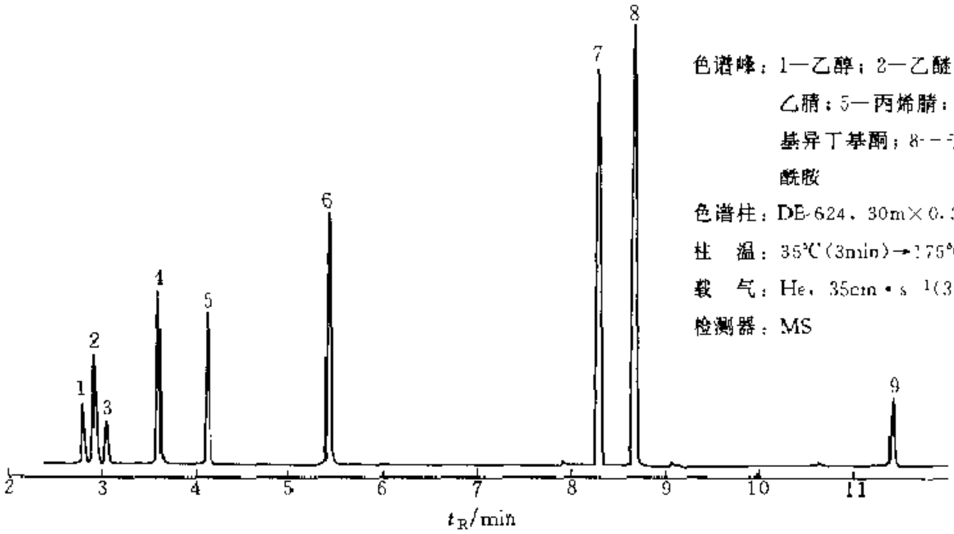
图 32-144　粗妥尔油[92]

色谱峰：1—β-石竹烯；2—2，6-双(1，1-甲基乙基)-4-甲酚；3—十四碳酸；4—十五烷酸；5—棕榈油酸；6—十六烷酸；7—14-甲基十六烷酸；8—十七烷酸；9—油酸；10—十八烷酸；11～16—十八碳二烯酸；17—海松酸；18—山达海松酸；19—顺-5，顺-11，顺-14-二十碳三烯酸；20—异海松酸；21—大间荆酸；22—脱氢脱氢松香酸；23—脱氢松香酸；24—二十烷酸；25—松香酸；26—新松香酸；27—7，13，15-松香三烯-18-酸；28—氧代脱氢松香酸；29—二十二烷酸；30—二十四烷酸；31—β-谷甾醇

色谱柱：OV-1701，25m×0.25mm，d_f=0.25μm　　检测器：FID

柱　温：30℃(5min)→260℃(30min)，4℃·min^{-1}　　气化室温度：冷柱头进样

载　气：H_2，30cm·s^{-1}　　检测器温度：260℃



色谱峰：1—乙醇；2—乙醛；3—丙烯醛；4—乙腈；5—丙烯腈；6—甲乙酮；7—甲基异丁基酮；8—三聚乙醛；9—丙烯酰胺

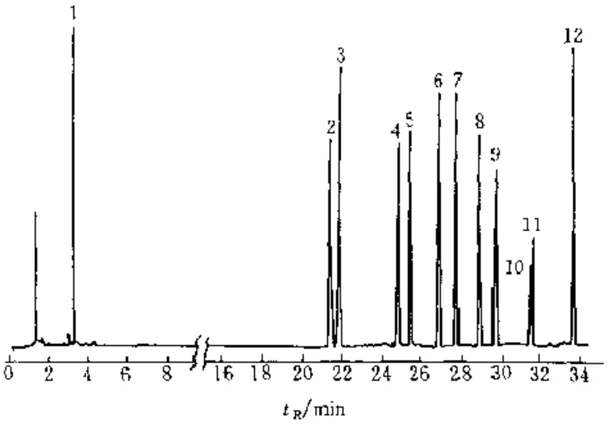
色谱柱：DB-624，30m×0.32mm，d_f=1.8μm

柱　温：35℃(3min)→175℃，15℃·min^{-1}

载　气：He，35cm·s^{-1}(35℃)

检测器：MS

图 32-145　丙烯腈——US EPA 方法 8030[5]



色谱峰：1—茅草枯；2—2,4-二氯苯基乙酸；3—麦草畏；4—2,4-滴丙酸；5—2,4-滴；6—4,4'-二溴八氟联苯（内标物）；7—五氯酚；8—2,4,5-涕丙酸；9—2,4,5-涕；10—2,4-滴丁酸；11—地乐酚；12—毒莠定

色谱柱：PTE-5，30m×0.32mm，d_f=0.25μm

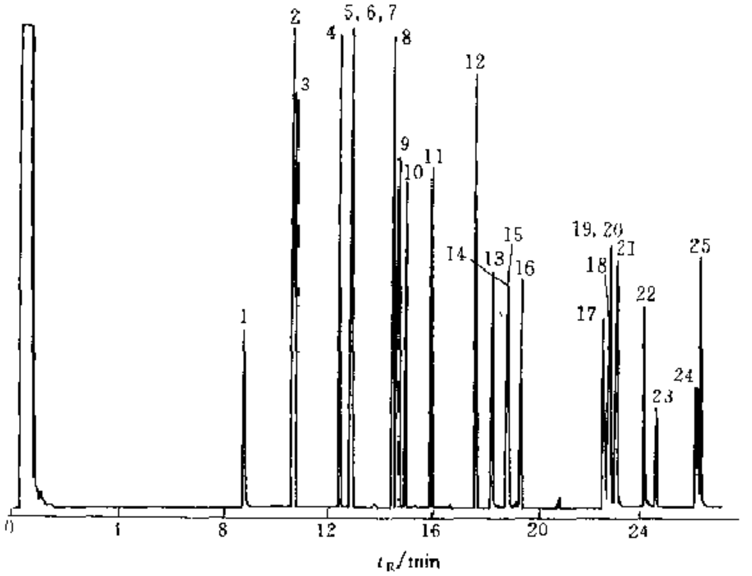
柱　温：60℃→300℃，4℃·min^{-1}

载　气：He，30cm·s^{-1}

检测器：ECD

检测器温度：310℃

图 32-146　有机氯农药——US EPA 方法 8150[8]



色谱峰：1—五氟酚；2—苯酚；3—2-氯酚；4—2-甲酚；5—3-甲酚；6—4-甲酚；7—2-溴酚；8—2,4-二甲酚；9—2-硝基酚；10—2,4-二氯酚；11—2,6-二氯酚；12—4-氯-3-甲酚；13—2,3,5-三氯酚；14—2,4,6-三氯酚；15—2,4,5-三氯酚；16—2,3,4-三氯酚；17—2,3,5,6-四氯酚；18—2,3,4,5-四氯酚；19—2,4-二硝基酚；20—2,3,4,6-四氯酚；21—4-硝基酚；22—2-甲基-4,6-二硝基酚；23—2,4,6-三溴酚；24—五氯酚；25—2-仲丁基-4,6-二硝基酚

色谱柱：SPB-608，30m×0.53mm，d_f=0.5μm

柱　温：40℃(4min)→250℃，8℃·min^{-1}

载　气：He

检测器：FID

检测器温度：275℃

图 32-147　酚类——US EPA 方法 8040[8]

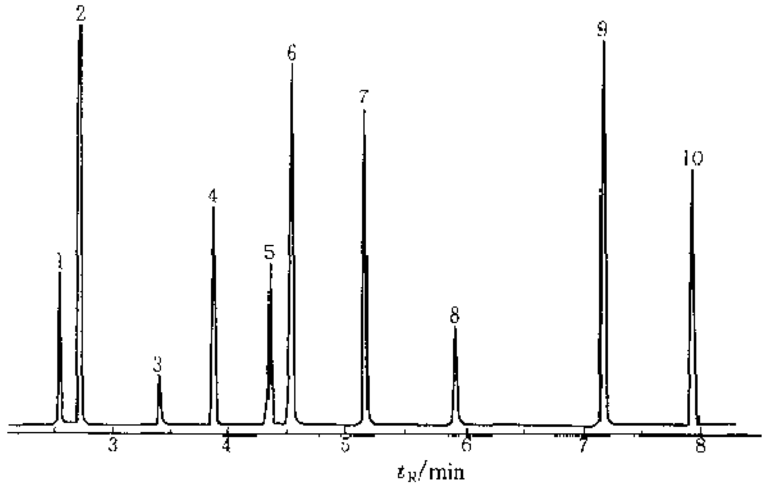


图 32-148　固体毒物——US EPA 方法 1311[15]

色谱峰：1—1,1-二氯乙烯；2—二氯甲烷；3—2-丁酮；4—氯仿；5—1，2-二氯乙烷；6—苯＋四氯化碳；7—三氯乙烯；8—吡啶；9—四氯乙烯；10—氯苯

色谱柱：DB-5.625，30m×0.25mm，d_f=0.5μm

柱　温：40℃(1min)→140℃，120℃·min⁻¹

载　气：He

检测器：MS

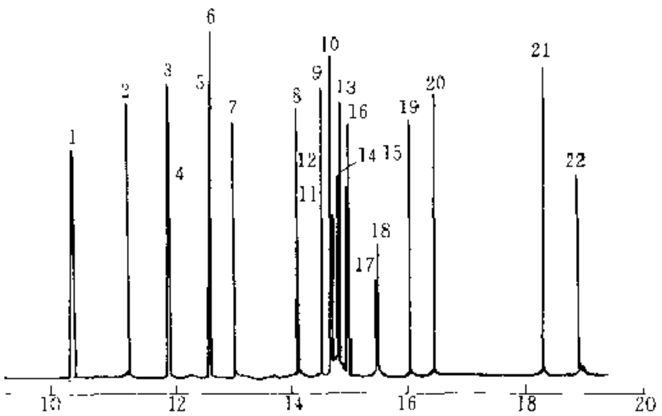


图 32-149　四氯二苯并对二噁英[43]

色谱峰❶：1—1,3,6,8；2—1,3,7,9；3—1,3,7,8；4—1,3,6,9；5—1,2,4,7；6—1,2,4,8；7—1,2,6,8；8—1,4,7,8；9—2,3,7,8；10—1,2,3,4；11—1,2,4,6；12—1,2,4,9；13—1,2,3,7；14—1,2,3,8；15—1,2,7,9；16—1,2,3,6；17—1,2,7,8；18—1,4,6,9；19—1,2,3,9；20—1,2,6,9；21—1,2,6,7；22—1,2,8,9

❶TCDD 异构体，TCDD 是二氯二苯并对二噁英的英文缩写。

色谱柱：Silar 10C，20m×0.1mm

柱　温：80℃(2min)→180℃，2℃·min⁻¹→250℃，4℃·min⁻¹→280℃(5min)，12℃·min⁻¹

载　气：H_2，45cm·s⁻¹

检测器：ECD

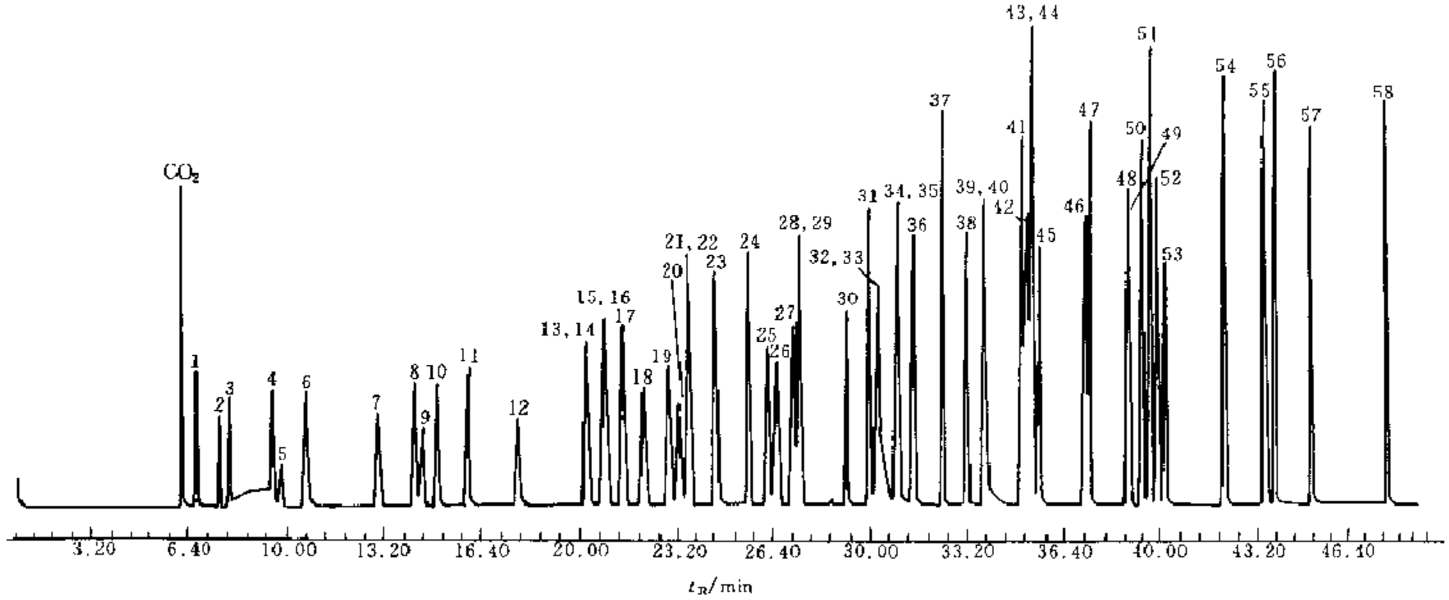


图 32-150 易挥发有机化合物——US EPA 方法 8260[8]

色谱峰：1—二氯二氟甲烷；2—氯代甲烷；3—氯乙烯；4—溴代甲烷；5—氯代乙烷；6—三氯一氟甲烷；7—1,1-二氯乙烯；8—碘代甲烷；9—烯丙基氯；10—二氯甲烷；11—反-1,2-二氯乙烯；12—1,1-二氯乙烷；13—丙腈；14—顺-1,2-二氯乙烯；15—异丁烯腈；16—氯仿；17—溴一氯甲烷（内标）；18—1,1,1-三氯乙烷；19—四氯化碳；20—1,2-二氯乙烷-d_4（代用品）；21—苯；22—1,2-二氯乙烷；23—1,4-二氟苯（内标）；24—三氯乙烯；25—1,2-二氯丙烷；26—异丁烯酸甲酯；27—一溴二氯甲烷；28—1,4-二噁烷；29—二溴甲烷；30—顺-1,3-二氯丙烯；31—甲苯-d_8（代用品）；32—甲苯；33—吡啶；34—异丁烯乙酯；35—反-1,3-二氯丙烯；36—1,1,2-三氯乙烷；37—四氯乙烯；38—二溴一氯甲烷；39—2-皮考啉；40—1,2-二溴乙烷；41—氯苯-d_5（代用品）；42—氯苯；43—1,1,1,2-四氯乙烷；44—乙苯；45—间二甲苯；46—邻二甲苯；47—苯乙烯；48—溴仿；49—顺-1,4-二氯丁烯；50—1,1,2,2-四氯乙烷；51—一溴一氟苯（代用品）；52—1,2,3-三氯丙烷；53—反-1,4-二氯丁烯；54—五氯乙烷；55—1,3-二氯苯；56—1,4-二氯苯；57—1,2-二氯苯；58—1,2-二溴-3-氯丙烷

色谱柱：VOCOL，105m×0.53mm，d_f=3.0μm

柱　温：35°C(10min)→200°C，4°C·min^{-1}

载　气：He，10ml·min^{-1}

检测器：MS

色谱峰：1—N-亚硝基二甲基胺；2—皮考啉；3—甲基甲磺酸盐；4—乙基甲磺酸盐；5—苯酚；6—苯胺；7—双（2-氯乙基）醚；8—2-氯苯酚；9—1,3-二氯苯；10—1,4-二氯苯；11—苯甲醇；12—1,2-二氯苯；13—2-甲基苯酚；14—双（2-氯异丙基）醚；15—4-甲基苯酚；16—苯乙酮；17—N-亚硝基二正丙基胺；18—六氯乙烷；19—硝基苯；20—N-亚硝基哌啶；21—异佛尔酮；22—2-硝基苯酚；23—2,4-二甲基酚；24—双（2-氯乙氧基）甲烷；25—苯甲酸；26—2,4-二氯苯酚；27—1,2,4-三氯苯；28—萘；29—(α,α)-二甲基苯乙基胺；30—4-氯苯胺；31—2,6-二氯苯酚；32—六氯丁二烯；33—N-亚硝基-二正丁基胺；34—4-氯-3-甲基苯酚；35—2-甲基萘；36—六氯环戊二烯；37—1,2,4,5-四氯苯；38—2,4,6-三氯苯酚；39—2,4,5-三氯苯酚；40—2-氯萘；41—1-氯萘；42—2-硝基苯胺；43—邻苯二甲酸二甲酯；44—2,6-二硝基甲苯；45—苊烯；46—3-硝基苯胺；47—苊；48—2,4-二硝基苯酚；49—4-硝基苯酚；50—五氯苯；51—2,4-二硝基甲苯；52—二苯并呋喃；53—1-萘胺；54—2,3,4,6-四氯苯酚；55—2-萘胺；56—邻苯二甲酸二乙酯；57—4-氯苯基苯基醚；58—芴；59—4-硝基苯胺；60—4,6-二硝基-2-甲基苯酚；61—二苯基胺；62—N-亚硝基二苯基胺分解物；63—1,2-二苯基肼；64—非那西汀；65—4-溴苯基苯基醚；66—六氯苯；67—4-氨基联苯；68—五氯苯酚；69—五氯硝基苯；70—普那迈；71—蒽；72—菲；73—邻苯二甲酸二正丁酯；74—荧蒽；75—联苯胺；76—芘；77—对二甲基氨基偶氮苯；78—邻苯二甲酸丁基苯基酯；79—3,3′-二氯联苯胺；80—邻苯二甲酸双(2-乙基己基)酯；81—苯并[a]蒽；82—䓛；83—邻苯二甲酸正辛酯；84—7,12-二甲基苯并[a]蒽；85—苯并[b]荧蒽；86—苯并[k]荧蒽；87—苯并[a]芘；88—3-甲基胆蒽烯；89—二苯并[a,j]吖啶；90—茚并[1,2,3-cd]芘；91—二苯并[a,h]蒽；92—苯并[ghi]苝

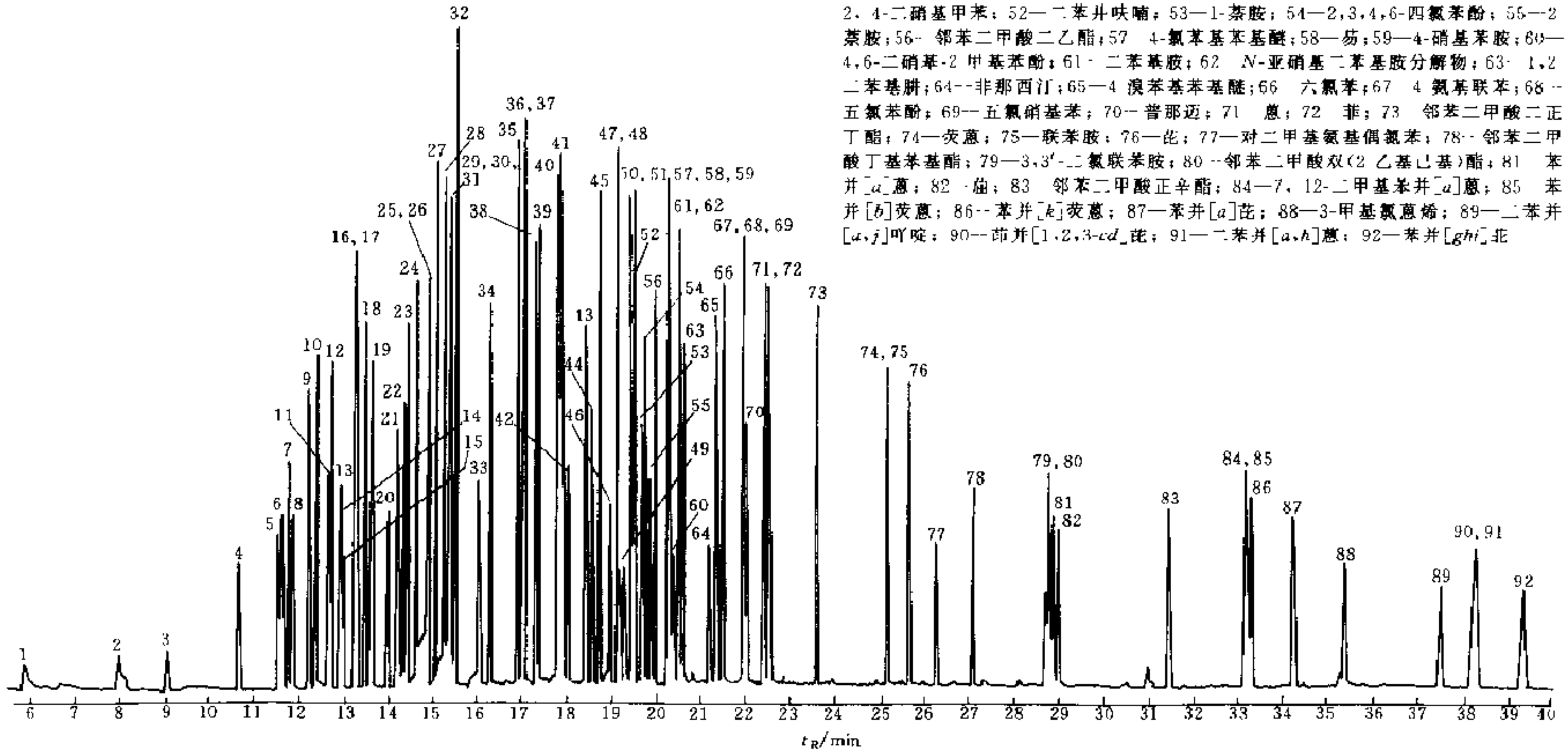


图 32-151 半挥发性有机物 US EPA 方法 8270[1]

色谱柱：DB-5ms，30m×0.25mm，d_f=0.5μm

柱 温：40℃(5min)→290℃(6min)，12℃·min^{-1}→325℃(5min)，20℃·min^{-1}

载 气：He，34.1cm·s^{-1}(150℃)

检测器：MS

气化室温度：250℃

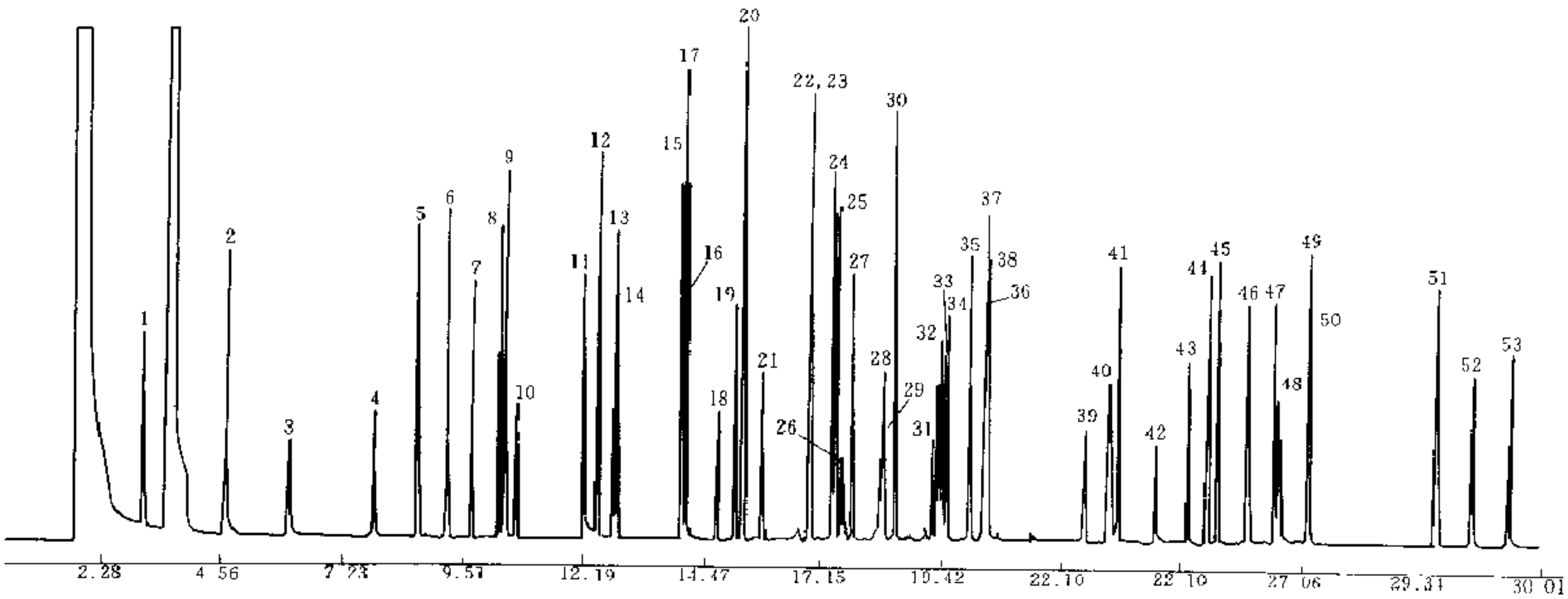


图 32-152 半挥发有机化合物——US EPA 方法 8270[8]

色谱峰：1—吡啶；2—2 皮考啉；3—甲磺酸甲酯；4—甲磺酸乙酯；5—苯胺；6—1，4-二氯苯-d_4(内标)；7—苯甲醇；8—苯乙酮；9—对甲苯胺；10—硝基苯-d_5（代用品）；11—二甲基苯基乙胺；12—萘-d_8（内标）；13—4-氯苯胺；14—六氯丙烯；15—1，4-苯二胺；16—黄樟脑；17—2-甲基萘；18—顺异黄樟脑；19—2-氯联苯；20—反异黄樟脑；21—2-硝基苯胺；22—苊-d_{10}(内标)；23—3-硝基苯胺；24—氧芴；25—五氯苯；26—1-萘胺；27—2-萘胺；28—5-硝基邻甲苯胺；29—4-硝基苯胺；30—二苯胺；31—1，3，5-三硝基苯；32—燕麦敌（异构体）；33—非那西汀；34—燕麦敌(异构体)；35—4-氨基联苯；36—五氯硝基苯；37—菲-d_{10}(内标)；38—拿草特；39—4-硝基喹啉并-N-氧化物；40—盐酸噻吡二胺；41—异艾氏剂；42—联苯胺；43—4-三联苯-d_{14}（代用品）；44—4-二甲基胺基偶氮苯；45—氯代联苯胺；46—开蓬；47—3，3′-二氯联苯胺；48—2-乙酰胺基芴；49—䓛-d_{12}(内标)；50—3，3′-二甲基联苯胺；51—7，12-二甲基苯并蒽；52—苝-d_{12}(内标)；53—3-甲基胆蒽

色谱柱：PTE-5，30m×0.25mm，d_f=0.25μm

柱 温：35℃(4min)→300℃，10℃·min^{-1}

载 气：He，35cm·s^{-1}

检测器：MS

参 考 文 献

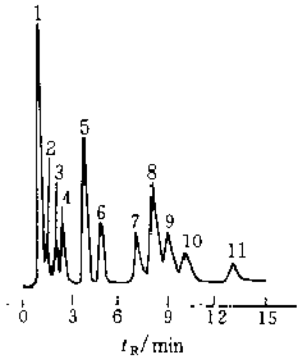
1 de Zeeuw J, de Nijs R CM, Henrich LT. J Chrom Sci, 1987; 25: 71
2 乔世俊, 葛宁春, 吴仁铭. 分析测试通报, 1988; 7 (2): 76
3 Lo J G, Chen T Y, Tso T L. Chromatographia, 1994; 38: 151
4 Matuska P, Koval M, Seiler W. HRC & CC, 1986; 9: 577
5 J Chrom Sci, 1993; 31: 196
6 Grob K, Grob G. J Chromatogr, 1971; 62: 1
7 GB 11737—89. 中国国家标准汇编, 1993: 141: 621
8 Supelco. Chromatography Prodcts, 1994: 676~752
9 GB 12209. 2—90. 中国国家标准汇编, 1993; 151: 333
10 GB 11738—89. 中国国家标准汇编, 1993; 144: 627
11 Cailleux A, Turcant A, Premel Cabic A, et al. Chromatographia, 1993; 37: 58
12 Do L, Ranlin F. J Chromatogr, 1989; 481: 45
13 Bruner F, Liberti A, Possanzini M, et al. Anal Chem, 1972; 44: 2070
14 GB 11741—89, 中国国家标准汇编, 1993: 144: 611
15 J& W Scientific. 1994—1995 Chomatography Catalog & Reference Guide, 1995; 131~161
16 黄文凤, 林应椿. 第九次全国色谱学术报告会文集, 1993: 285
17 Ross W D. Environ Sci Technol, 1972; 6: 155
18 Dell R. J Chromatogr, 1976: 128: 271
19 GB 11890—89. 中国国家标准汇编, 1993: 146: 359
20 GB 11937—89. 中国国家标准汇编, 1993: 147: 245
21 de Nijs R CM. Chrompack News, 1983; 10(3): 9
22 朗博顿 J E、利希滕伯格 JJ 编. 王克欧等编译. 城市和工业废水中有机化合物分析. 北京: 学术期刊出版社, 1989: 11~115
23 Swinehert B A, Anal Chem, 1968: 40: 427
24 Hollis O L. Anal Chem, 1966: 38: 309
25 Hrivank J, Steklac M. J Chromatogr, 1984; 286; 353
26 SGE. Analytical Products 1993/1994 Catalogue, 1994: 72
27 赵丽辉, 王菊思. 环境化学, 1986; 8(3): 70
28 J Chrom Sci, 1988; 26: 537
29 Fresenius W, Quentin K E, Schneider W 著. 张曼平等译. 水质分析. 北京: 北京大学出版社, 1991: 320~330
30 傅若农, 刘虎威. 高分辨气相色谱及高分辨裂解气相色谱. 北京: 北京理工大学出版社, 1992: 222
31 GB 11934—89. 中国国家标准汇编, 1993; 147: 236
32 Alltech. Chromatogrphy Catalog 350, 1995; 34~68
33 Johns Manville Co. J Chrom Sci, 1969; 7(4): 21A
34 Dressman R C. J Chrom Sci, 1972; 10: 472
35 黄国兰, 黄玉明. 分析化学, 1994; 22: 1197
36 岛津. Gas Chromatograph Data Sheet. C A180 924
37 GB 11936—89. 中国国家标准汇编, 1993; 147: 312
38 孙铭、尹伟、欧维平等. 色谱, 1992; 10: 288
39 国家环保局《水和废水监测分析方法》编委会. 水和废水监测分析方法. 第3版. 北京: 中国环境科学出版社, 1989: 391
40 Kolb B, Auer M, Pospisil P. J Chromatogr, 1983; 279: 341
41 Shimadzu. Applcation News, C 180-0013
42 Simmonds P G. J Chromatogr. 1984; 289: 117
43 Onuska F I, Wilkinson R I, Terry K. HRC & CC, 1988; 11: 9

44 de Zeeuw J, de Nijs R C M. Chrompack News, 1984; 11(2):4
45 GB 11938—89. 中国国家标准汇编, 1993; 147: 249
46 施梅儿, 千科达, 陶凤群等. 色谱, 1986; 4: 163
47 Abrahamsson K, Xie T M. J Chromatogr, 1983; 279: 199
48 Knuutrinen J. Tarhanen J, Lahtipera M. Chromatographia, 1982; 15: 9
49 葛振盈. 色谱, 1987; 5: 118
50 徐福正, 汀桂斌, 韩恒斌. 分析化学, 1995; 23: 1308
51 李植生, 徐盈, 丘昌强. 色谱, 1985; 2: 338
52 Hernandey F, Morell I, Beltran J, et al. Chromatographia, 1993; 37: 303
53 GB 7492—87. 中国国家标准汇编, 1991; 86: 644
54 Shirey R E. HRC, 1995; 18: 495
55 Klee M S, Chang I. HRC, 1991; 14: 18
56 SGE. Analytical Products catalogue, 1993/1994. catalogue. 1994: 49
57 J Chrom Sci, 1987; 25: 315
58 Chrompack News, 1982; 9(2):12
59 GB/T 13904 92
60 Chrompack News, 1985; 12(3):10
61 Belkin F, Bishop R W, Sheely M V, J Chrom Sci, 1985; 23: 532
62 Chrompack News, 1984; 11(1): 3
63 魏爱雪, 赵国栋, 刘晓榜等. 环境化学, 1986; 5(2): 17
64 GB 11935—89. 中国国家标准汇编, 1993; 147: 239
65 Cochran J W, Henson J M. HRC, 1988; 11: 869
66 Mosesman N H, Sidisky L M, Corman S D. J Chrom Sci, 1987; 25: 351
67 Lattanzi L, Attaran Rezaii M. Chromatographia, 1994; 38: 114
68 Shirey R E. HRC, 1995; 18: 495
69 Attaran Rezaii M, Lattanzi. Chromatographia, 1994; 38: 235
70 Supelco. Supelco Catalog 18: 12
71 Hewlett. Packard 赠送资料
72 高毅飞, 王仁萍等. 色谱, 表象 85; 2: 212
73 Lopey-Avila V, Wood R, Flanagan M, et al. J Chrom Sci, 1987; 25: 286
74 黄长荣, 梁汉昌, 韩守廷. 色谱, 1996; 14: 421
75 GB 11939—89. 中国国家标准汇编, 1993; 147: 253
76 GB 13194 —91. 中国国家标准汇编, 1993; 166: 392
77 Hayes M A. J Chrom Sci, 1988; 26: 146
78 GB 11940—89. 中国国家标准汇编, 1993; 147: 257
79 冯晓双, 陈伟. 分析化学, 1995; 23: 453
80 王玉芳, 邱云佳, 叶永荣. 全国第二届毛细管色谱报告会文集, 1984: 268
81 Grob K, Jr, Grob K. Chromatoraphia, 1977: 10: 254
82 Giger W, Schaffner C. Anal Chem, 1978; 50: 243
83 Buijten J, Blomberg L, Hoffman S, et al. J Chromatogr, 1984; 289: 143
84 康致泉, 边雅明, 王广峰等. 第四次全国色谱学术报告会文集, 1983: 232
85 Matsusbita H, Lida Y. HRC, 1986; 9: 708
86 赵振华. 多环芳烃的环境健康化学. 北京: 中国国家科学技术出版社, 1993: 7
87 Knobloch T, Engewald W. HRC, 1993; 16: 239
88 Vandegrift S A, Kampbell D H. J Chrom Sci, 1988; 26: 566
89 Liu Y, Lopey-Avila V, Alcaray M, et al. HRC, 1994; 17: 527
90 孙安强, 陈荣莉, 孙维相. 第王次全国色谱学术报告会文集, 195: 329
91 卫煜英, 曹艳平. 第十次全国色谱学术报告会文集, 1995: 249
92 Nogueira J M F, Pereira J L C, Sandra P. HRC, 1995; 18: 425

(李浩春 李全洪)

第三十三章　其他类化合物色谱图

第一节　溶剂色谱图



色谱峰：1—正戊烷；2—氯仿；3—正己烷；4—苯；5—正庚烷；6—甲苯；7—正辛烷；8—乙基苯；9—间二甲苯；10—邻二甲苯；11—正壬烷

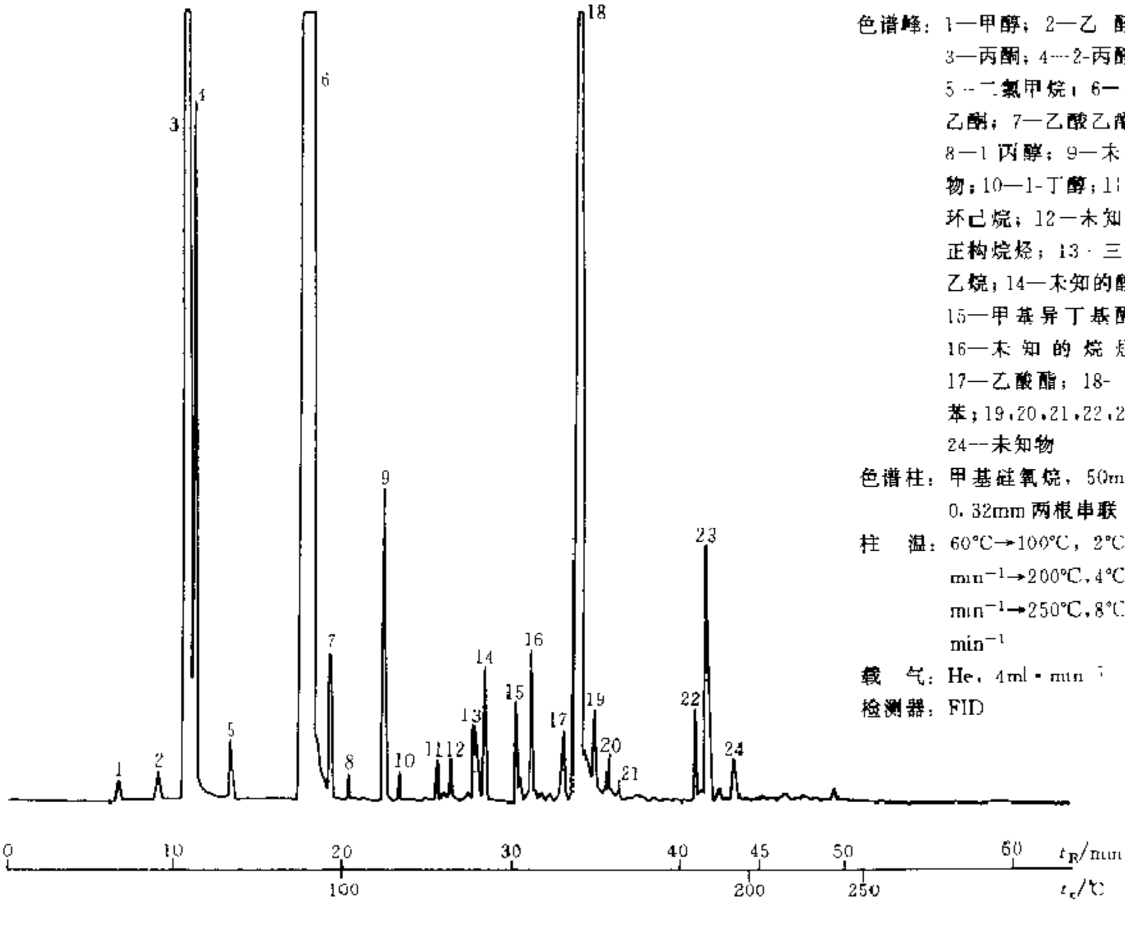
色谱柱：Chemipack C18（80目～100目），1.8m×2mm

柱　温：120℃

载　气：N_2，40ml·min^{-1}

检测器：FID

图 33-1　溶剂（一）[1]



色谱峰：1—甲醇；2—乙醇；3—丙酮；4—2-丙醇；5—二氯甲烷；6—甲乙酮；7—乙酸乙酯；8—1-丙醇；9—未知物；10—1-丁醇；11—环己烷；12—未知的正构烷烃；13—三氯乙烷；14—未知的醇；15—甲基异丁基酮；16—未知的烷烃；17—乙酸酯；18—甲苯；19，20，21，22，23，24—未知物

色谱柱：甲基硅氧烷，50m×0.32mm两根串联

柱　温：60℃→100℃，2℃·min^{-1}→200℃，4℃·min^{-1}→250℃，8℃·min^{-1}

载　气：He，4ml·min^{-1}

检测器：FID

图 33-2　溶剂（二）[2]

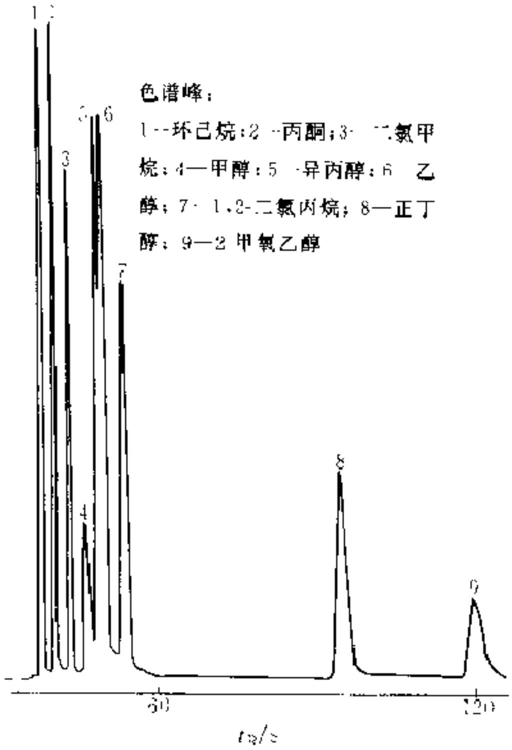


图 33-3 溶剂（三）[3]

色谱柱：OV-17，35m×0.47mm
柱 温：60℃
载 气：N_2，100cm·s^{-1}
检测器：FID

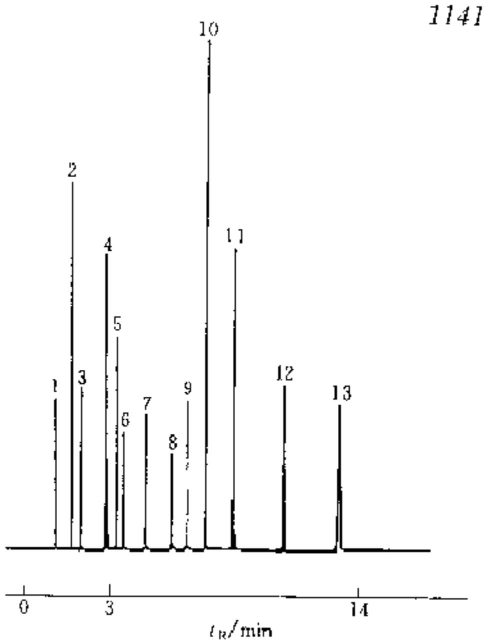
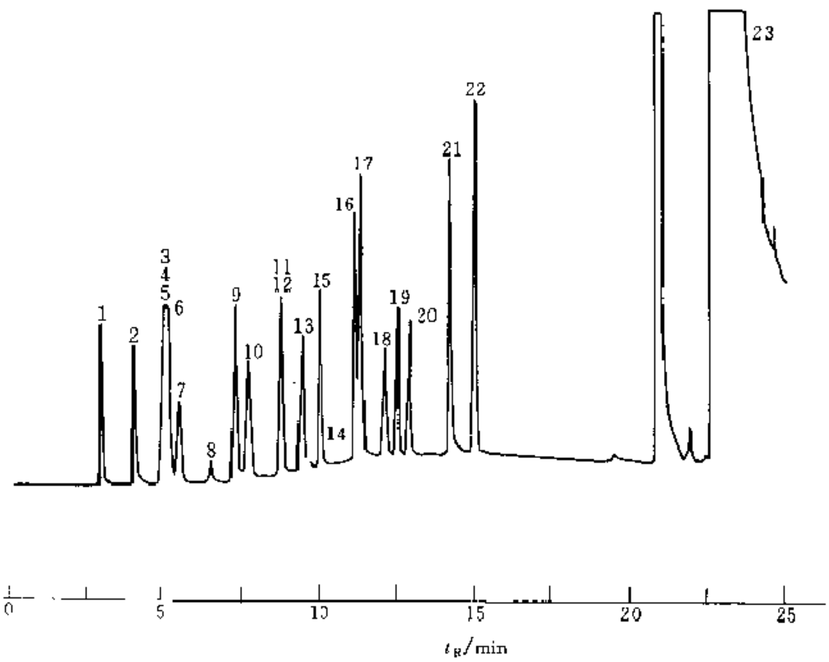


图 33-4 溶剂（四）

色谱峰：1—甲醇；2—2-丙醇；3—二氯甲烷；4—2-丁醇；5—乙酸乙酯；6—四氢呋喃；7—正丁醇；8—二噁烷；9—3-甲基丁醇；10—甲苯；11—乙酸丁酯；12—环己烷；13—1,2,3-三甲苯

色谱柱：OV-1，25m×0.32mm
柱 温：30℃（3min）→100℃，10℃·min^{-1}
载 气：He　　气化室温度：250℃
检测器：FID　　检测器温度：280℃



色谱峰：
1—甲醇；2—乙醇；3—2-丙醇；4—乙腈；5—丙酮；6—正戊烷；7—乙醚；8—二氯甲烷；9—正丙醇；10—甲基-1-丁基醚；11—甲基乙基酮；12—正己烷；13—乙酸乙酯；14—氯仿；15—四氢呋喃；16—正丁醇；17—苯；18—异辛烷；19—正庚烷；20—1,4-二噁烷；21—吡啶；22—甲苯；23—苯甲醇

图 33-5 溶剂（五）[5]

色谱柱：Rt$_x$-5，30m×0.53mm，d_f=5μm（不包括预柱）
柱 温：35℃（5mim）→175℃，8℃·min^{-1}→250℃（16min），70℃·min^{-1}
载 气：He
检测器：FID
气化室温度：180℃
检测器温度：260℃

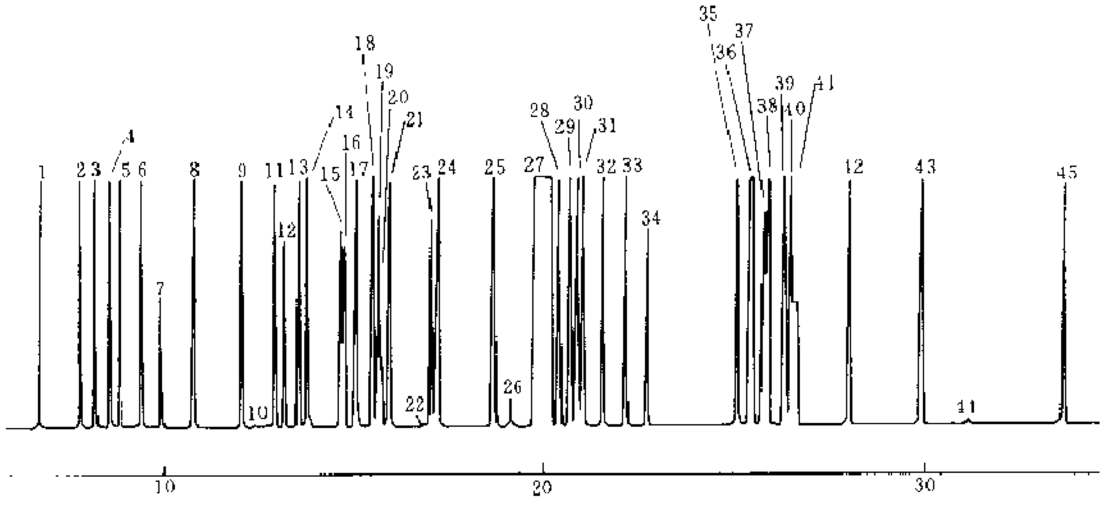


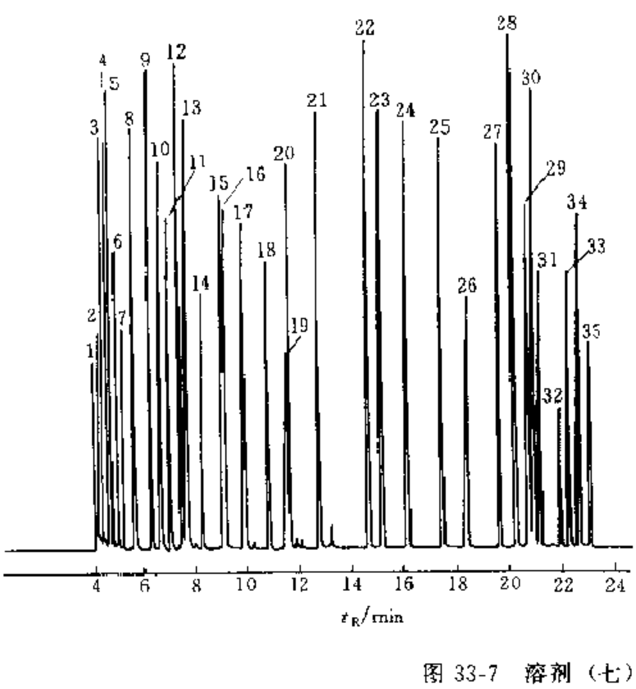
图 33-6 溶剂（六）[6]

色谱峰：1—甲醇；2—乙醇；3 乙腈；4—丙酮或异丙醇；5—乙醚或正戊烷；6—甲酸乙酯；7—二氯甲烷；8 正丙醇；9 甲乙酮；10,22,26,31,44—未知物；11—乙酸乙酯；12 三氯甲烷；13—异丁醇；14—乙二醇-甲基醚或四氢呋喃；15—乙二醇二甲基醚；16—1,1,1-三氯乙烷；17—乙酸异丙酯或正丁醇；18—苯；19—1-甲氧基-2-丙醇；20 四氯甲烷；21—环已烷；23 -1,4 二噁烷；24—三氯乙烯或异辛烷或乙二醇-乙基醚；25 -甲基异丁基酮；27—二甲替甲酰胺；28—乙酸异丁酯；29—甲苯；30—3-已酮；32—乙二醇二乙基醚或异丙叉丙酮；33—乙酸正丁酯；34—乙酸-2-甲氧基乙基酯；35—乙基苯；36—间二甲苯或对二甲苯；37—乙酸乙氧基乙基酯；38—环已酮；39—苯乙烯；40—乙二醇一丁基醚；41—邻二甲苯；42—异丙基苯；43—1,3,5-三甲基苯；45—乙酸丁氧基乙基酯

色谱柱：CP-Sil 5 CB，50m×0.32mm，d_f=1.2μm　　检测器：FID

柱　温：40℃（3min）→250℃（3min），5℃·min^{-1}　　气化室温度：250℃

载　气：N_2，1ml·min^{-1}　　检测器温度：250℃



色谱峰：1—甲醇；2—甲酸甲酯；3—乙醇；4—丙酮；5—异丙醇；6—甲酸乙酯；7—二氯甲烷；8—正丙醇；9—甲乙酮；10—仲丁醇；11—乙酸乙酯+三氯甲烷；12—四氢呋喃；13—甲基纤维素+异丁醇；14—1,1,1 三氯乙烷；15—乙酸异丙酯；16—正丁醇；17—2-硝基丙烷；18—1,4-二噁烷；19—乙基纤维素；20—未知物；21—甲基异丁基酮；22—甲苯；23—乙酸异丁酯；24—苯基氯化物；25—乙酸正丁酯 26—二丙酮醇；27—5-甲基-2-己酮；28—乙基苯；29—间二甲苯+对二甲苯；30—环己酮；31—未知物；32—邻二甲苯；33—乙酸纤维素酯；34—丁基纤维素；35 乙酸异戊酯

色谱柱：SE 30，60m×0.50mm

柱　温：30℃（8min）→125℃，4℃·min^{-1}

载　气：He

检测器：FID

图 33-7 溶剂（七）[7]

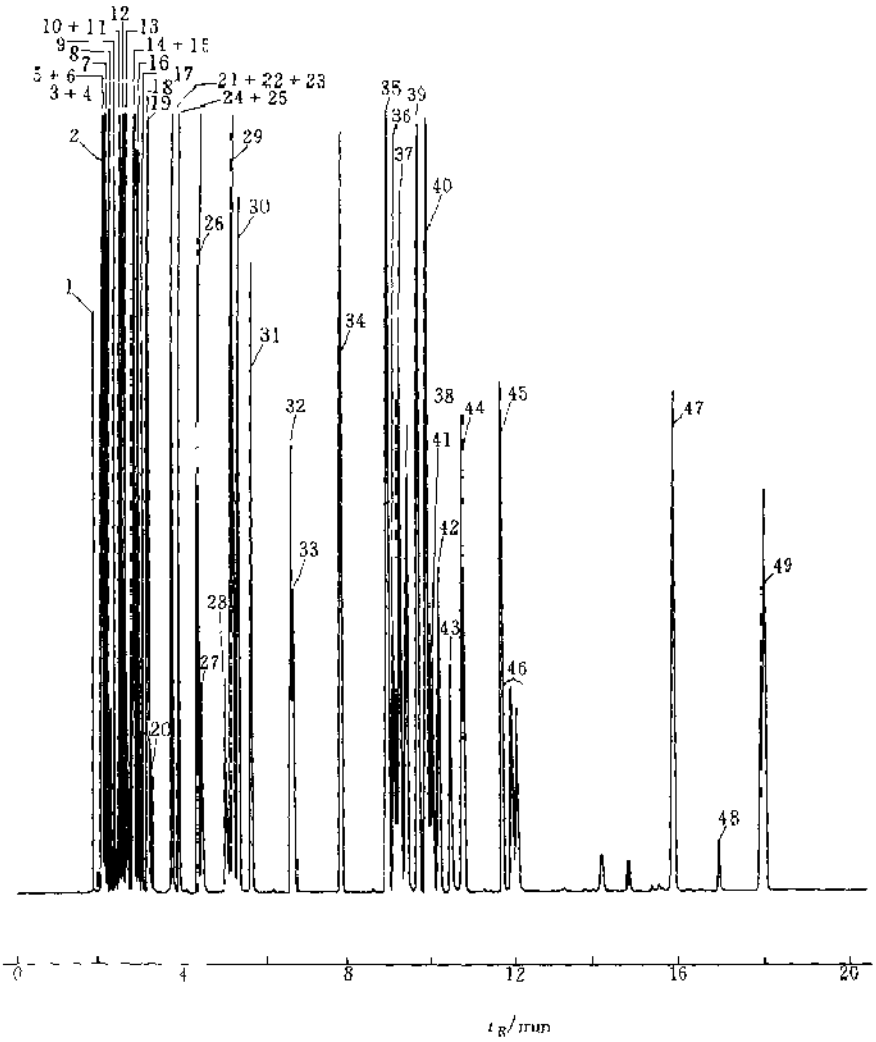


图 33-8 溶剂（八）[8]

色谱峰：1—乙醚；2—己烷；3,4—二硫化碳＋丙酮；5,6—乳酸甲酯＋1,2-二氯乙烯；7—四氢呋喃；8—四氯化碳；9—1,1,1-三氯乙烷；10,11—乙酸乙酯＋乙酸异丙酯；12—甲醇；13—甲乙酮；14,15—异丙醇＋二氯甲烷；16—乙酸正丙酯；17—三氯乙烯；18—甲基异丁基酮；19—乙酸异丁酯；20—四氯乙烯；21,22,23—氯仿＋2-丁醇＋甲苯；24,25—1,4-二噁烷＋1,2-二氯乙烷；26—乙酸正丁酯；27—甲基丁基酮；28—异丁醇；29—乙酸异戊酯；30—对二甲苯；31—间二甲苯；32—1-丁醇；33—乙酸正戊酯；34—甲基纤维素；35—邻二甲苯；36—异戊醇；37—氯苯；38—纤维素；39—苯乙烯；40—环己酮；41—甲基环己酮；42—醋酸纤维素；43—*N*，*N*-二甲基甲酰胺；44—环己醇；45—丁基纤维素；46—甲基环己醇；47—邻二氯苯；48—1,1,2,2-四氯乙烷；49—邻甲酚

色谱柱：CBP1，25m×0.2mm，d_f＝0.25μm

柱　温：50℃（5mim）→200℃，4℃・min^{-1}

载　气：He，0.98ml・min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：280℃

检测器温度：280℃

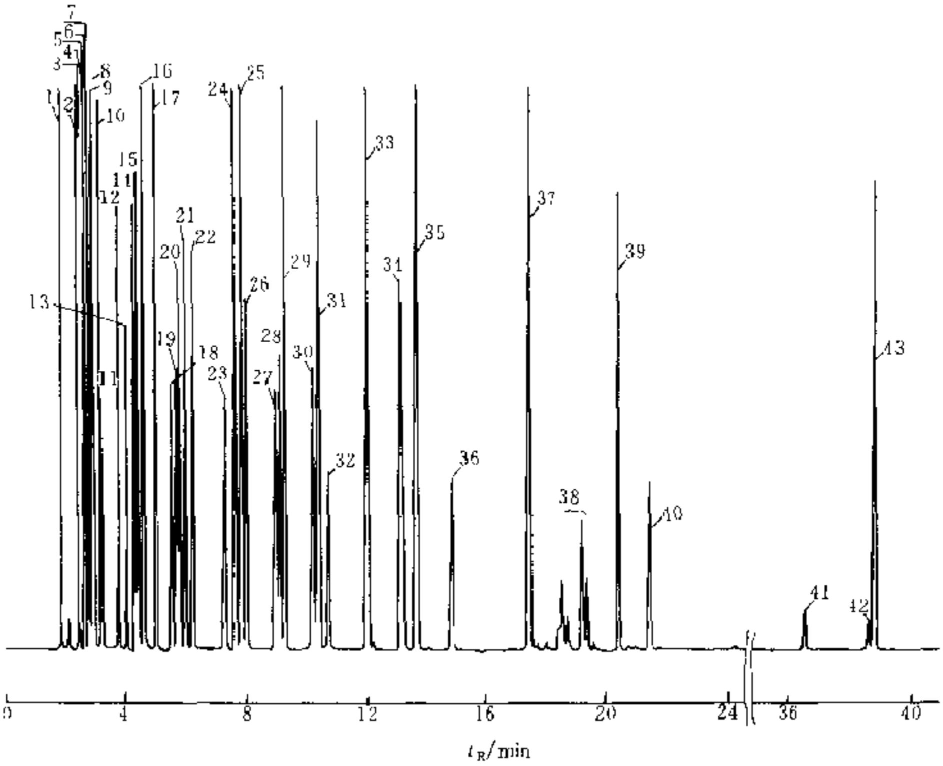


图 33-9 溶剂（九）[8]

色谱峰：1—乙醚＋己烷；2—丙酮；3—乳酸甲酯；4—1,2-二氯乙烯；5—四氢呋喃＋四氯化碳；6—1,1,1-三氯乙烷；7—乙酸乙酯；8—乙酸异丙酯＋甲醇；9—甲乙酮；10—异丙醇；11—二氯甲烷；12—乙酸正丙酯；13—三氯乙烯；14—甲基异丁基酮；15—乙酸异丁基酯；16—四氯乙烯＋氯仿＋2-丁醇；17—甲苯；18—1,4-二噁烷；19—1,2-二氯乙烷；20—乙酸正丁酯；21—甲基丁基酮；22—异丁醇；23—乙酸异戊酯；24—对二甲苯；25—间二甲苯；26—1-丁醇；27—乙酸正戊酯；28—甲基纤维素；29—邻二甲苯；30—异戊醇；31—氯苯；32—纤维素；33—苯乙烯；34—环己酮；35—甲基环己酮＋醋酸纤维素；36—*N*,*N*-二甲基甲酰胺；37—环己醇＋丁基纤维素；38—甲基环己醇；39—邻二氯苯；40—1,1,2,2-四氯乙烷；41—邻甲酚；42—对甲酚；43—间甲酚

色谱柱：CBP20，25m×0.2mm，d_f＝0.25μm

柱　温：50℃（5min）→200℃，4℃·min^{-1}

载　气：He，0.98ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：280℃

检测器温度：280℃

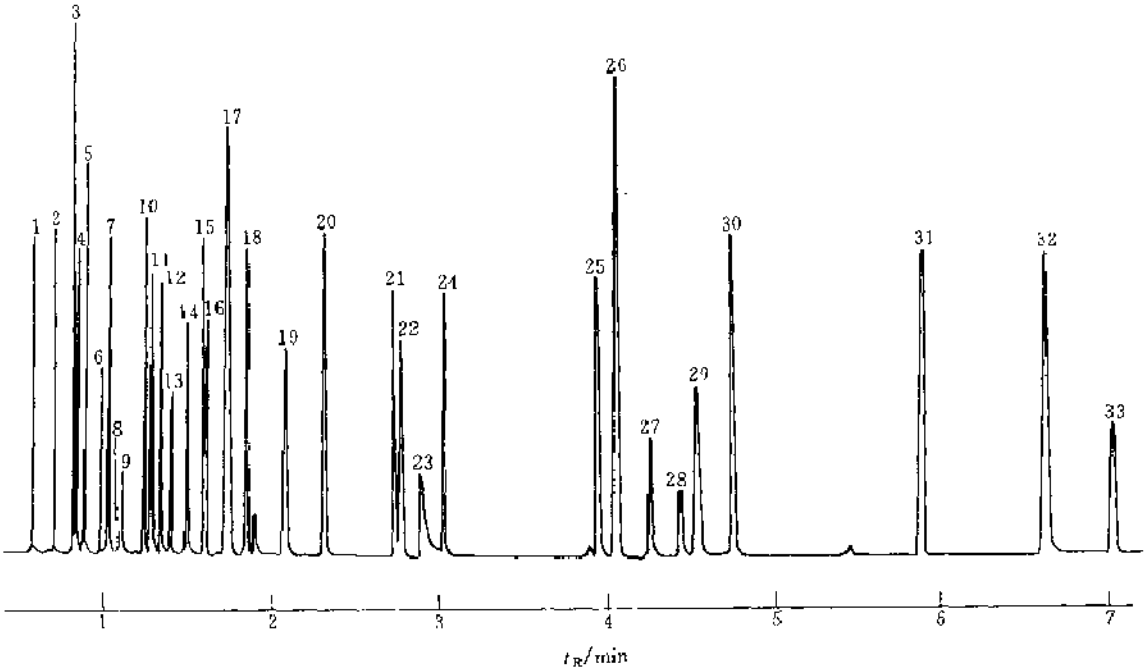


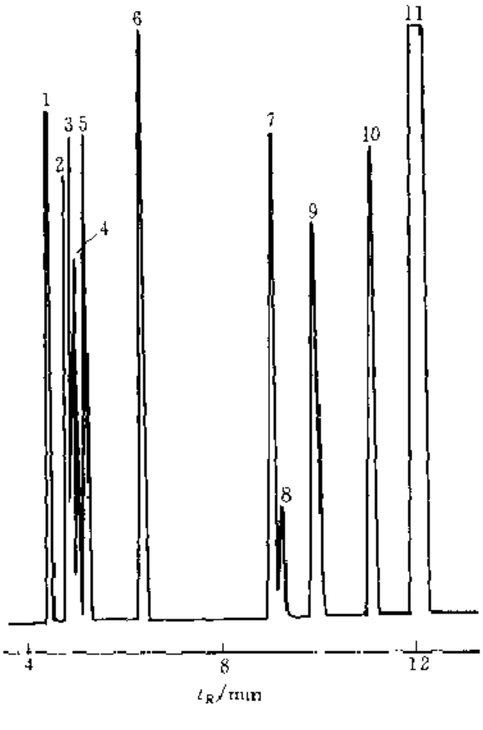
图 33-10 溶剂（十）[5]

色谱峰：1—甲醇；2—乙醇；3—丙酮；4—乙醚；5—甲酸乙酯；6—二氯甲烷；7—正丙醇；8—二硫化碳；9—反1,2二氯乙烯；10—甲乙酮；11—乙酸乙酯；12—顺-1,2-二氯乙烯；13—氯仿；14—四氢呋喃；15—正丁醇；16—1,2-二氯乙烷；17—苯；18—异辛烷；19—对二噁烷；20—异丁基甲基酮；21—甲苯；22—乙基丙基酮；23—二甲基甲酰胺；24—乙酸丁酯；25—正丁基醚＋间二甲苯；26—对二甲苯；27—环己醇；28—邻二甲苯；29—丙二酸二甲酯＋环己酮；30—苯甲醚；31—萜醇；32—苯甲醇；33—二丁基酮

色谱柱：SE-54，12.8m×0.50mm，d_f＝1μm

柱　温：100℃→180℃，10℃·min^{-1}

载　气：H_2，1.4bar（1.4×10^5Pa）



色谱峰：1—氧化丙烯；2—乙烯叉氯；3—丙酮；4—二甲氧基甲烷；5—异丙醇；6—甲乙酮；7—氧化丁烯；8—硝基甲烷；9—2-甲基戊烷；10—2-丁醇；11—1,1,1-三氯乙醇

色谱柱：DB-1，6m×0.32mm，d_f=1.0μm 柱与 DB-624，30m×0.32mm，d_f=1.8μm 柱串联

柱　温：35℃

载　气：He，34cm·s^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250℃

检测器温度：300℃

图 33-11 溶剂（十一）[9]

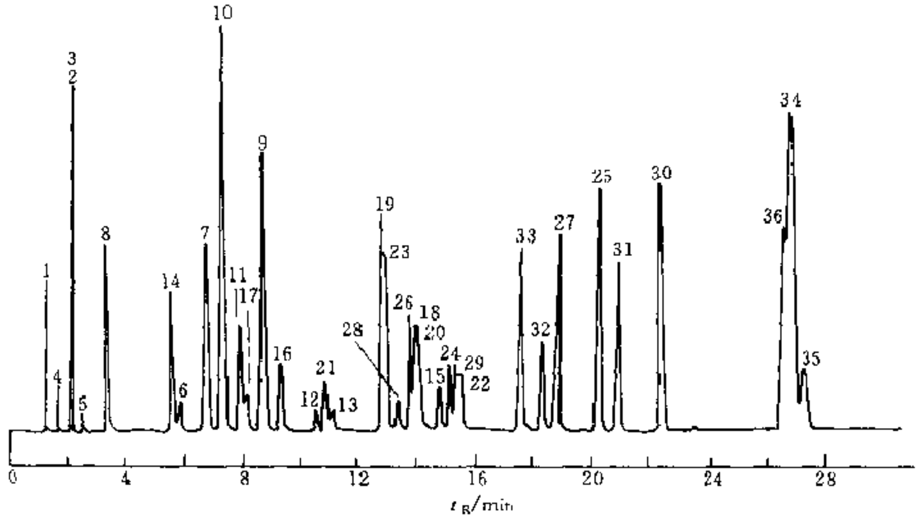


图 33-12　卤代烃类溶剂[10]

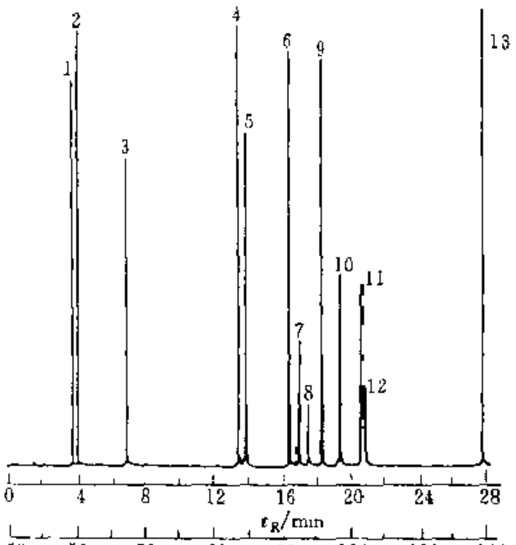
色谱峰：1—氯代甲烷；2—二氯二氟甲烷；3—氯乙烯；4—溴代甲烷；5—氯乙烷；6—三氯氟甲烷；7—1,1-二氯乙烯；8—二氯甲烷；9—反-1,2-二氯乙烯；10—1,1-二氯乙烷；11—顺-1,2-二氯乙烯；12—1,1,1-三氯乙烷；13—四氯化碳；14—溴氯甲烷；15—苯；16—1,2-二氯乙烷；17—三氯甲烷；18—三氯乙烯；19—1,2-二氯丙烷；20—反-1,3二氯丙烯；21—溴二氯甲烷；22—2-氯乙烷基乙烯基醚；23—顺-1,3二氯丙烯；24—1-氯-2-溴丙烷；25—甲苯；26—1,1,2三氯乙烷；27—四氯乙烯；28—二溴氯甲烷；29—三溴甲烷；30—乙基苯；31—氯苯；32—1,4-二氯丁烷；33—1,1,2,2-四氯乙烷；34—1,2-二氯苯；35—1,4-二氯苯；36—1,3-二氯苯

色谱柱：Carbopack F（60 目～80 目），2m×2mm　　检测器：FID

柱　温：40℃（2min）→250℃，9℃·min^{-1}　　气化室温度：200℃

载　气：N_2，40ml·min^{-1}　　检测器温度：250℃

第二节　高分子材料色谱图



色谱峰：1—丙烯酸乙酯；2—异丁烯酸甲酯；3—异丁烯酸乙酯；4—聚乙烯；5—丙烯酸正丁酯；6—异丁烯酸异丁酯；7—2-羟基丙基丙烯酸酯；8—1-甲基-2羟基乙基丙烯酸酯；9—异丁烯酸正丁酯；10—2-羟基乙基异丁烯酸酯；11—2-羟基丙基异丁烯酸酯；12—1-甲基-2-羟基乙基异丁烯酸酯；13—2-乙基己基丙烯酸酯

色谱柱：二甲基聚硅氧烷，25m×0.33mm，d_f=1.0μm

柱　温：50℃（10min）→150℃，5℃·min^{-1}→250℃（10min），40℃·min^{-1}

载　气：He

检测器：FID

气化室温度：220℃

检测器温度：250℃

图 33-13　标准单体混合物[11]

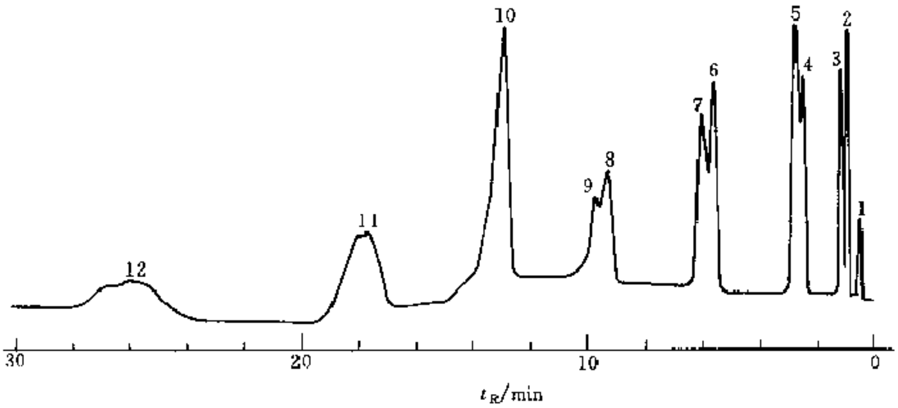


图 33-14　低密度聚乙烯[12]

色谱峰：1—甲烷；2—乙烯；3—乙烷；4—丙烯；5—丙烷；6—正丁烯；7—正丁烷；8—正戊烯；9—正戊烷；10—己烯；11—庚烯；12—辛烯

色谱柱：Porapak Q（50 目～80 目），1.52m×4mm

柱　温：100℃→200℃，8℃ • min^{-1}

载　气：N_2，60ml • min^{-1}

检测器：FID

裂解器：居里点裂解器（10s）

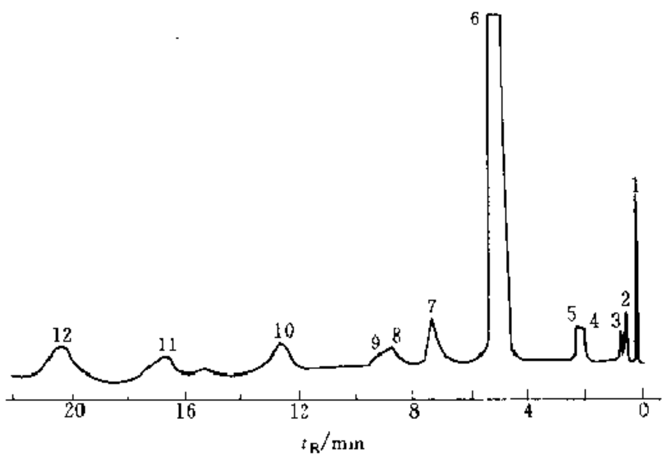


图 33-15　乙烯与异丁烯（45：55）共聚物[12]

色谱峰：1—甲烷；2—乙烯；3—乙烷；4—丙烯；5—丙烷；6—正丁烯+异丁烯；7—新戊烷；8—正戊烯；9—正戊烷；10—己烷；11—庚烯；12—辛烷

色谱柱：Porapak Q（50 目～80 目），1.52m×4mm

柱　温：100℃→200℃，8℃ • min^{-1}

载　气：N_2，60ml • min^{-1}

检测器：FID

裂解器：居里点裂解器（10s）

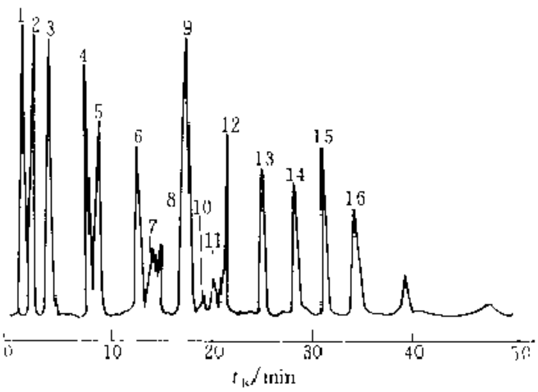


图 33-16　聚乙烯乙酸乙烯酯[13]

色谱峰：1—甲烷；2—乙烯；3—丙烯；4—1-丁烯；5—2-丁烯；6—1-戊烯；7—1,3-戊二烯；8—3-戊烯-1-炔；9—1-己烯；10—2,4-己二烯；11—苯；12—1-庚烯；13—1-辛烯；14—1-壬烯；15—1-癸烯；16—1-十一碳烯

色谱柱：GDX 502(80 目～100 目)＋10% SE-30,Chromosrb W AW DMCS(60 目～80 目)体积比为 1∶1;4m×3mm

柱　温：65℃→220℃，5℃·min^{-1}

检测器：MS

进样方式：在650℃裂解 30s

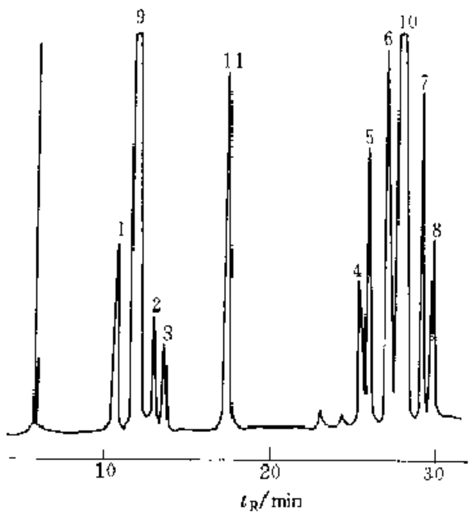


图 33-17　乙二醇低聚合物 C_9～C_{10} α-烯馏分[14]

色谱峰：1—正辛烷；2—反-2-辛烯；3—顺-2-辛烯；4—2-丁基-1-己烯；5—正癸烷；6—2-乙基-1-辛烯；7—反-2-癸烯；8—顺-2-癸烯；9—1-辛烯；10—1-癸烯；11—内标物

色谱柱：聚苯基醚（五环），50m×0.25mm，d_f＝0.27μm

柱　温：60℃→100℃，2℃·min^{-1}

载　气：He，(1.5～1.8) ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250℃～320℃

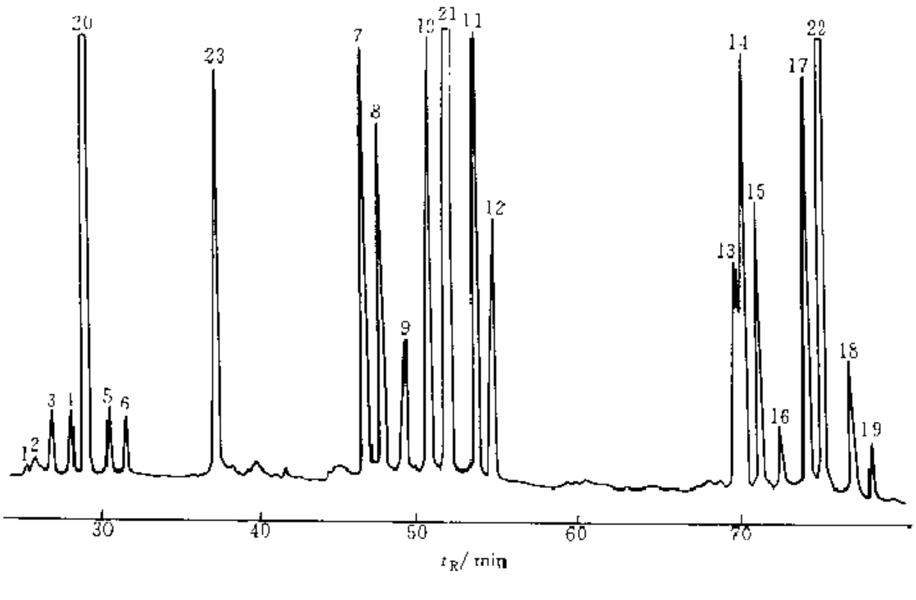


图 33-18　乙二醇低聚合物 C_{14}～C_{18} α-烯馏分[14]

色谱峰：1—2-己基-1-辛烯；2—2-丁基-1-癸烯；3—正十四烷；4—2-乙基-1-十二烯；5—反-2-十四烯；6—顺-2-十四烯；7—2-己基-1-癸烯；8—2-丁基-1-十二烯；9—正十六烷；10—2-乙基-1-十四烯；11—反-2-十六烯；12—顺-十六烯；13—2-辛基-1-癸烯；14—2-己基-1-十二烯；15—2-丁基-1-十四烯；16—正十八烷；17—2-乙基-1-十八烯；18—反-2-十八烯；19—顺-2-十八烯；20—1-十四烯；21—1-十六烯；22—1-十八烯；23—内标物

色谱柱：聚苯基醚（5 环），50m×0.25mm，d_f＝0.27μm

柱　温：120℃→190℃，1℃·min^{-1}

载　气：He，(2.6～2.8) ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250～320℃

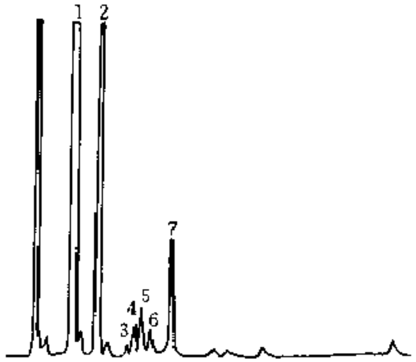


图 33-19 聚丁二烯橡胶[16]

色谱峰：1—苯；2—甲苯；3—乙基苯；4—对二甲苯；5—间二甲苯；6—邻二甲苯；7—苯乙烯

色谱柱：5% 聚苯醚+5% 有机皂土 34，红色硅藻土（60 目～80 目），3m×3mm

柱 温：80℃→190℃，6℃·min^{-1}

载 气：N_2

检测器：FID

气化室温度：200℃

检测器温度：200℃

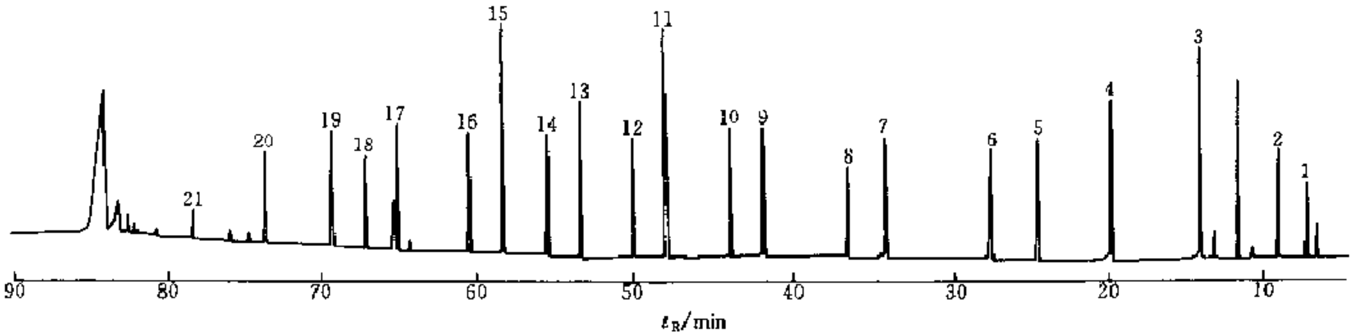


图 33-20 十二烷基环戊烷热解产品[15]

色谱峰：1—1-丁烯；2—1-戊烯；3—1-己烯；4—甲基环戊烷；5—1-庚烯；6—乙烯基环戊烷；7—1-辛烷；8—丙烯基环戊烷；9—1-壬烯；10—4-丁烯基环戊烷；11—1 癸烯；12—5-戊烯基环戊烷；13—1-十一烯；14—6 己烯基环戊烷；15—1-十二烯；16—7-庚烯基环戊烷；17—8-辛烯基环戊烷；18—1-十四烯；19—9-壬烯基环戊烷；20—10-癸烯基环戊烷；21—十一烯基环戊烷

色谱柱：OV-1，55m×0.2mm

柱 温：30℃→220℃，3℃·min^{-1}

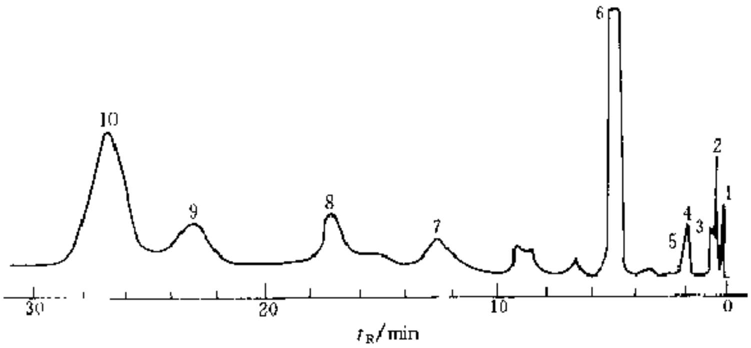


图 33-21　苯乙烯-丁二烯橡胶[12]

色谱峰：1—甲烷；2—乙烯；3—乙烷；4—丙烯；5—丙烷；6—1,3-丁二烯；7—苯；8—甲苯；9—4-乙烯基-1-环己烯；10—苯乙烯

色谱柱：Porapak Q（50 目～80 目），1.52m×4mm

柱　温：100℃→200℃，8℃・min⁻¹

载　气：N_2，60ml・min⁻¹

检测器：FID

裂解器：居里点裂解器（10s）

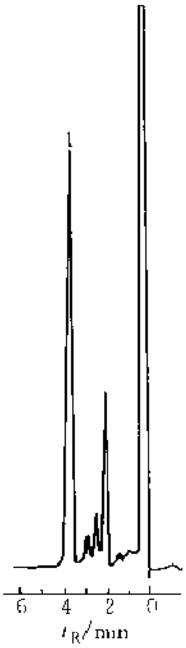


图 33-22　聚苯乙烯泡沫塑料中的苯乙烯

色谱峰：1—苯乙烯

色谱柱：15% Reoplex 400，Chromosorb W（80 目～100 目），2m×3mm

柱　温：130℃

检测器：FID

气化室温度：180℃

检测器温度：180℃

进样方式：顶空法，120℃

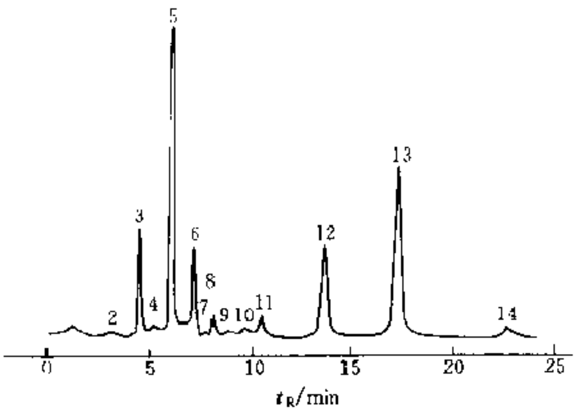


图 33-23　聚苯乙烯（Mr=10300）[17]

色谱峰：1—C_2～C_4 烃；2—苯；3—甲苯；4—乙基苯；5—苯乙烯；6—α-甲基苯乙烯；7—仲丁基苯；8—β-甲基苯乙烯；9—正丁基苯；10—正戊基苯；11—4 苯基-1,3-丁二烯；12—1,3-二苯基丙烯；13—1,3-二苯基丁烯二聚物；14—1,4-二苯基 1,3-丁二烯

色谱柱：10% Apiezon L，Diasolid L（80 目～100 目），2m×3mm

柱　温：50℃→250℃，20℃・min⁻¹

载　气：N_2，35ml・min⁻¹

检测器：FID

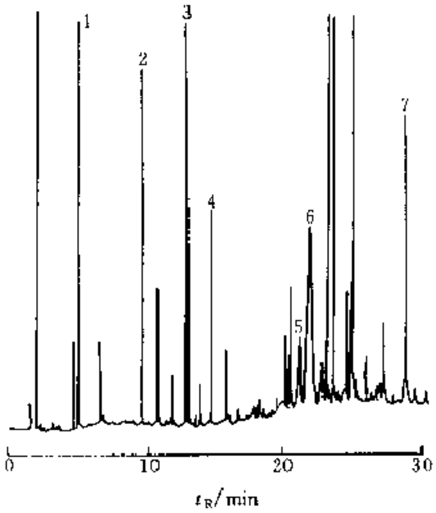


图 33-24　ABS 树脂裂解产物[5]

色谱峰：1—丙烯腈；2—甲苯；3—苯乙烯；4—α 甲基苯乙烯；5—AAS；6—ASA；7—SSS

色谱柱：OV 1701，25m×0.25mm

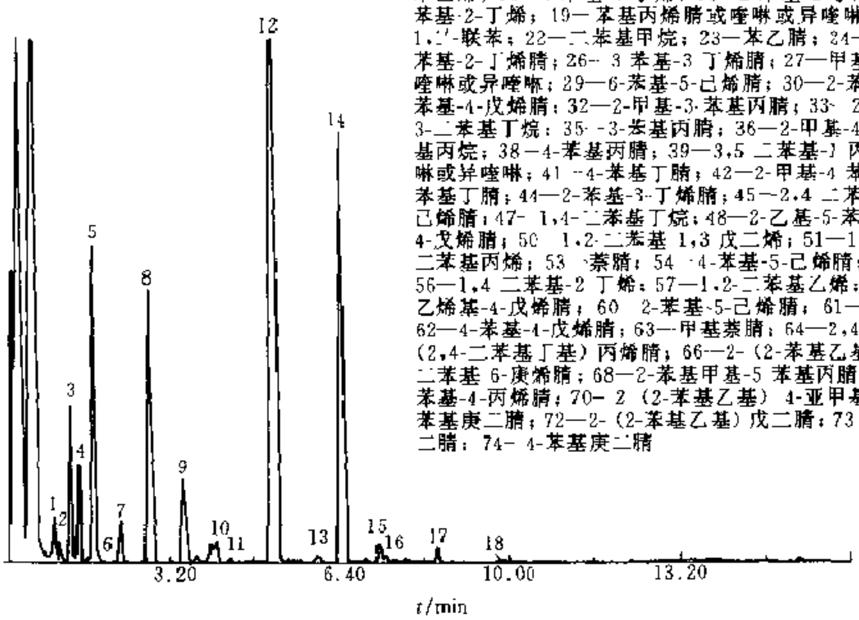
柱　温：50℃（3min）→250℃，10℃・min⁻¹

载　气：He

裂解条件：590℃，5s

色谱峰：

1—苯；2—4-乙基环己烷；3—丙烯腈；4—甲基丙烯腈或3-丁烯腈；5—甲苯；6—2-甲基丙腈；7—丁腈；8—二甲基苯或乙基苯；9—异丙苯；10—丙苯；11—乙基甲苯或三甲基苯；12—苯乙烯；13—丁基苯；14—α-甲基苯乙烯；15—4-苯基-1-丁烯；16—2-苯基-2-丁烯；17—丙烯基苯；18—1-苯基-2-丁烯；19—苯基丙烯腈或喹啉或异喹啉；20—2-苯基丙腈；21—1,1′-联苯；22—二苯基甲烷；23—苯乙腈；24—1,1-二苯基乙烯；25—4-苯基-2-丁烯腈；26—3-苯基-3-丁烯腈；27—甲基萘腈；28—苯基丙烯腈或喹啉或异喹啉；29—6-苯基-5-己烯腈；30—2-苯基甲基-3-丁烯腈；31—2-苯基-4-戊烯腈；32—2-甲基-3-苯基丙腈；33—2-苯基甲基丙烯腈；34—1,3-二苯基丁烷；35—3-苯基丙腈；36—2-甲基-4-苯基丁腈；37—1,3-二苯基丙烷；38—4-苯基丙腈；39—3,5-二苯基-1-丙烯；40—苯基丙烯腈或喹啉或异喹啉；41—4-苯基丁腈；42—2-甲基-4-苯基-2,4-丙二烯腈；43—3-苯基丁腈；44—2-苯基-3-丁烯腈；45—2,4-二苯基-1-丁烯；46—5-丙基-5-己烯腈；47—1,4-二苯基丁烷；48—2-乙基-5-苯基-3-戊烯腈；49—3-苯基-4-戊烯腈；50—1,2-二苯基-1,3-戊二烯；51—1,5-二苯基戊烷；52—1,3-二苯基丙烯；53—萘腈；54—4-苯基-5-己烯腈；55—2,6-二苯基-2-己烯；56—1,4-二苯基-2-丁烯；57—1,2-二苯基乙烯；58—萘腈；59—5-苯基-2-乙烯基-4-戊烯腈；60—2-苯基-5-己烯腈；61—2-乙基-5-苯基-4-戊烯腈；62—4-苯基-4-戊烯腈；63—甲基萘腈；64—2,4,6-三苯基-1-己烯；65—2-(2,4-二苯基丁基)丙烯腈；66—2-(2-苯基乙基)-4-苯基丁腈；67—4,6-二苯基-6-庚烯腈；68—2-苯基甲基-5-苯基丙腈；69—2-(2-苯基乙基)-4-苯基-4-丙烯腈；70—2-(2-苯基乙基)-4-亚甲基丙二腈；71—2-亚甲基-4-苯基庚二腈；72—2-(2-苯基乙基)戊二腈；73—2-(2-苯基-2-丙烯基)丙二腈；74—4-苯基庚二腈



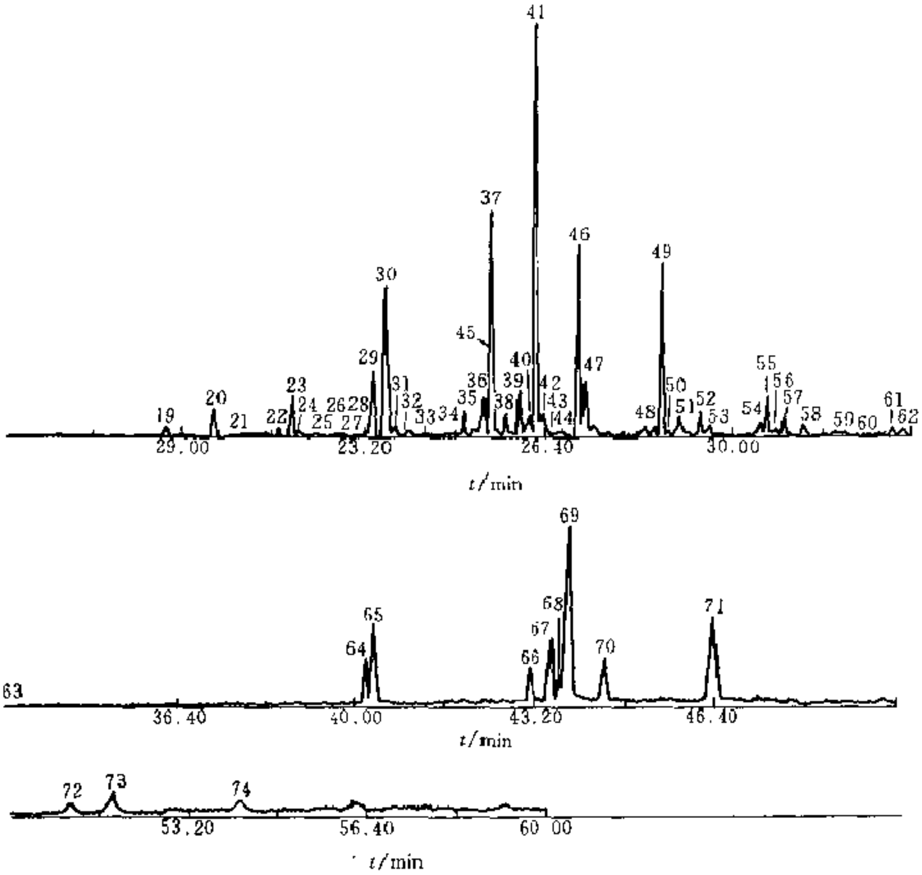


图 33-25 ABS 塑料在 N_2 气中热解产物[20]

色谱柱：SP-2330，27m×0.2mm，d_f=0.2μm

柱 温：50℃ (1min) →240℃ (20min)，5℃·min^{-1}

载 气：He，2ml·min^{-1}

检测器：MS

气化室温度：250℃

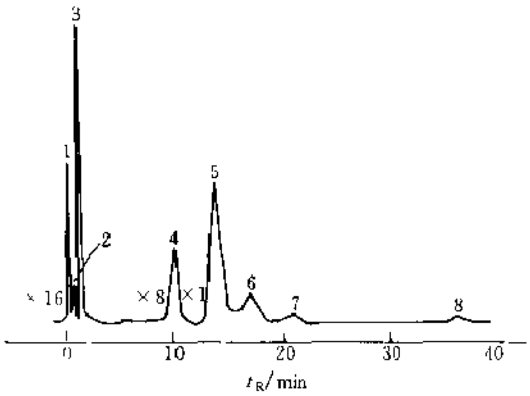


图 33-26　聚萘裂解产物[16]

色谱峰：1　低碳烃；2　苯；3　甲苯；4　萘；5　β-甲基萘；6　α-甲基萘；7　乙基萘；8　丁烯基萘

色谱柱：5% PEG 20M，3m×4mm 填充柱

柱　温：155℃

载　气：N_2，40ml・min^{-1}

检测器：FID

进样方式：用丝式裂解器，裂解温度600℃，裂解时间 5s

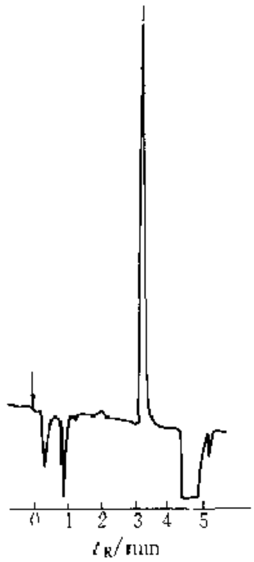


图 33-27　丙烯腈

色谱峰：1—丙烯腈

色谱柱：0.4% Carbowax 1500，石墨，2m×3mm

柱　温：80℃

载　气：N_2，25ml・min^{-1}

检测器：NPD

气化室温度：150℃

检测器温度：150℃

进样方式：顶空法，150℃

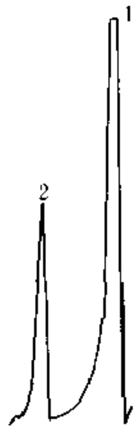


图 33-28　聚丙烯酰胺中丙烯酰胺[24]

色谱峰：1—甲醇；2—丙烯酰胺

色谱柱：20% Carbowax 20M，Chromosorb W HP（60目～80目），2m×3mm

柱　温：165℃

载　气：N_2，20ml・min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：230℃

检测器温度：240℃

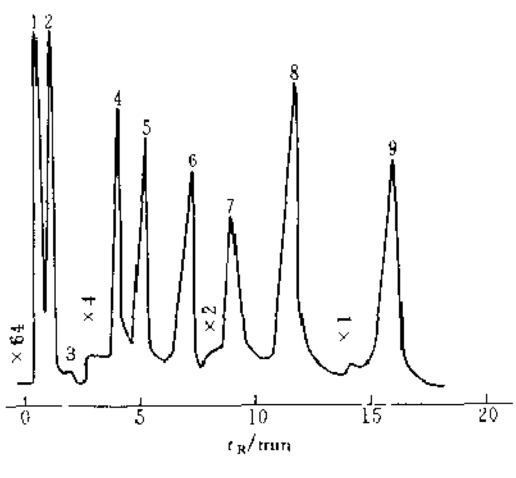


图 33-29　聚酰胺树脂（TMS 衍生物）[21]

色谱峰：1　乙腈；2—双（三甲基硅烷基）乙酰胺；3—三甲基硅烷基乙酰胺；4—己二酸；5　β-氨基已酸；6　己二胺；7—辛二酸；8—ŋ-氨基正辛酸；9—辛二胺

色谱柱：5% 新戊二醇丁二酸聚酯，Celite 545（80目～100目），2m×3mm

柱　温：160℃　　　气化室温度：230℃

载　气：He，40ml・min^{-1}　　　检测器温度：260℃

检测器：TCD

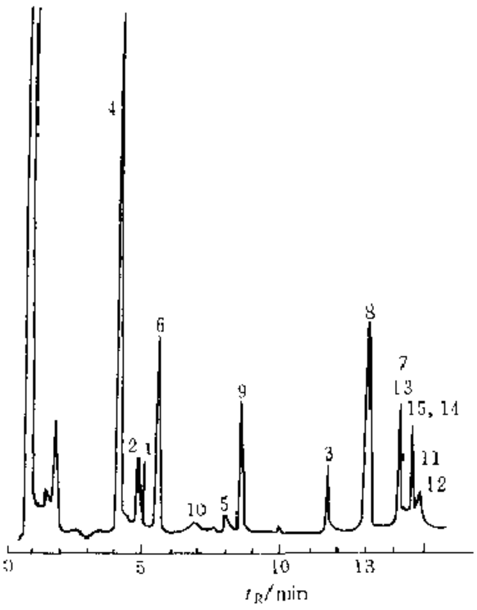


图 33-30　氨基甲酸乙酯泡沫塑料[23]

色谱峰：1—乙腈；2—丙烯腈；3—吡咯；4—苯；5—吡啶；6　甲苯；7　苯胺；8　苯甲腈；9　苯乙烯；10　乙基苯；11—间甲苯胺；12—对甲苯胺；13—异氰酸苯酯；14　邻、间、对-甲代亚苯基二胺；15　萘

色谱柱：10% PEG-6000，Diasolid L（80目～100目），2m×3mm

柱　温：50℃→210℃，12℃・min^{-1}　检测器：FID

载　气：N_2，20ml・min^{-1}　　　进样方式：居里点裂解

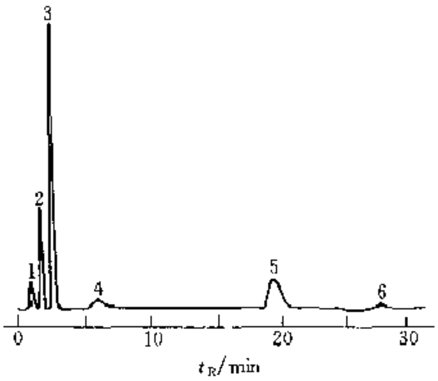


图 33-31　四苯基卟啉裂解产物[24]

色谱峰：1—低碳烃；2—苯；3—甲苯；4—苯乙烯；5—吡咯；6—甲基吡咯

色谱柱：5% PEG-20M，3m×4mm

柱　温：110℃

载　气：N_2，40ml·min^{-1}

检测器：FID

裂解器：丝式裂解头，裂解温度700℃，时间5s

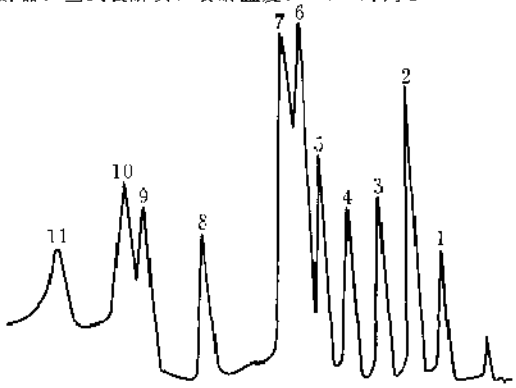


图 33-32　聚酯型聚胺酯（水合肼降解物）[27]

色谱峰：1—乙二醇；2—1,2-丙二醇；3—1,2-丁二醇+2,3-丁二醇；4—1,3-丁二醇；5—1,4-丁二醇；6—甘油+二缩乙二醇；7—2-甲基戊二醇；8—1,6-己二醇；9—二缩三乙二醇；10—三羟甲基丙烷；11—季戊四醇

色谱柱：上海试剂厂401有机担体（60目～80目），1m×4mm

柱　温：150℃→250℃，5℃·min^{-1}　　检测器：FID

载　气：N_2，32ml·min^{-1}

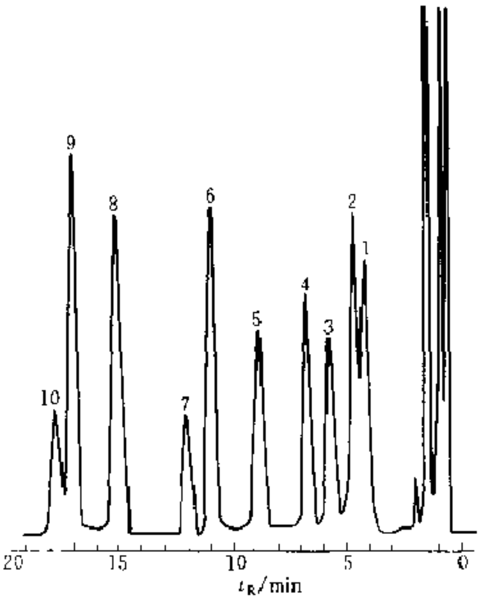


图 33-33　聚酯中多元醇（降解后衍生物）[26]

色谱峰：1—乙二醇；2—1,2-丙二醇；3—2,3-丁二醇；4—1,3-丁二醇；5—1,4-丁二醇；6—一缩乙二醇；7—甘油；8—三羟甲基丙烷；9—二缩三乙二醇；10—季戊四醇

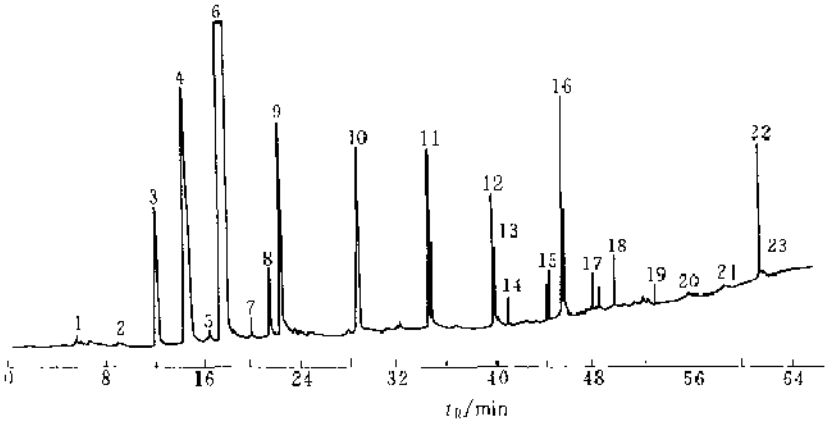
色谱柱：5% SE-30，上海试剂厂201担体（60目～80目），2m×4mm

柱　温：90℃（2min）→180℃，5℃·min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FID

气化室温度：220℃



色谱峰：
1—甲烷；2—苯；3—甲苯；4—六甲基环三硅氧烷；5—乙苯；6—苯乙烯；7—烯丙基苯；8—α-甲基苯乙烯；9—八甲基环四硅氧烷；10—十甲基环五硅氧烷；11—十二甲基环六硅氧烷；12—十四甲基环七硅氧烷；13—1,2-二苯基己烷；14—1,2-二苯基丙烷；15—十六甲基环八硅氧烷；16—2,4-二苯基-1-丁烯；17—十八甲基环九硅氧烷；18—2,5-二苯基-1,5-己二烯；19—二十甲基环十硅氧烷；20—二十二甲基环十一硅氧烷；21—二十四甲基环十二硅氧烷；22—2,4,6-三苯基-1-己烯；23—二十六甲基环十三硅氧烷

图 33-34　苯乙烯-二甲基硅氧烷嵌段共聚物裂解产物[28]

色谱柱：OV-1，44m×0.23mm　　检测器：MS

柱　温：40℃→320℃，5℃·min^{-1}　　裂解条件：875℃，20s

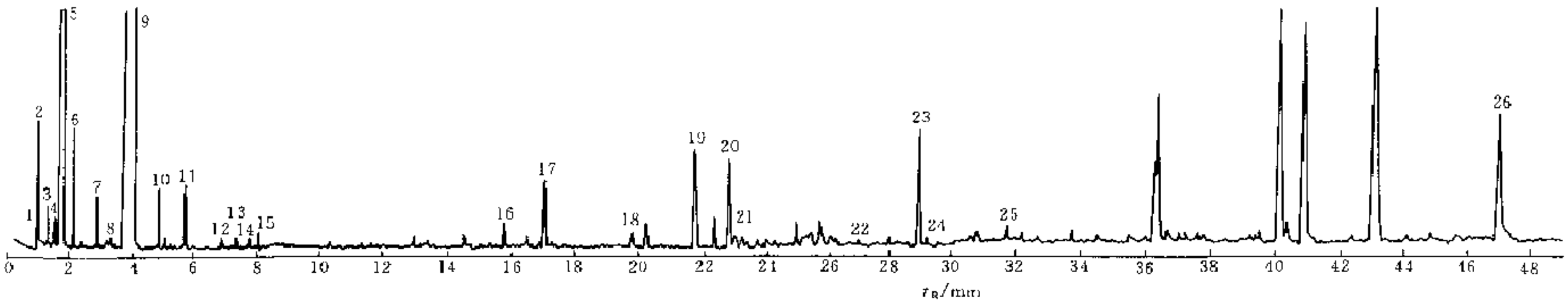


图 33-35　MBS 聚合物裂解[25]

色谱峰：1—空气；2—丁二烯；3—丙酸甲酯；4—异丁酸甲酯；5—异丁烯酸甲酯；6—甲苯；7—4-乙烯基环己烯；8—乙基苯；9—苯乙烯；10—2-苯烯基苯；11—异丙烯基苯；12—1-丙烯基苯；13—3-丁烯基苯；14—2-苯基-1-丁烯；15—苯乙酮；16—2-甲基-3-苯基丙酸甲酯；17—2-次甲基-3-苯基丙酸甲酯；18—2-次甲基-4-苯基丁酸甲酯；19—2-甲基-4-苯基-4-戊烯酸甲酯；20—2-甲基-5-苯基戊酸甲酯；21—1,2-二苯基乙烷；22—1,3-二苯基丙烷；23—2,4-二苯基-1-丁烯；24—2,4-二苯基-1-戊烯；25—1,4-二苯基-1-丁烯；26—2,4,6-三苯基-1-己烯

色谱柱：HP-5，30m×0.32mm，d_f=0.53μm

柱　温：40℃（1min）→250℃，4℃·min^{-1}

载　气：He

检测器：MS

裂解方式：590℃，5s

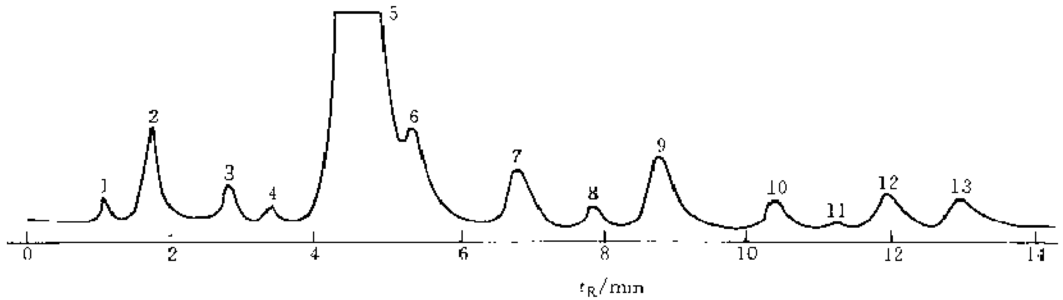


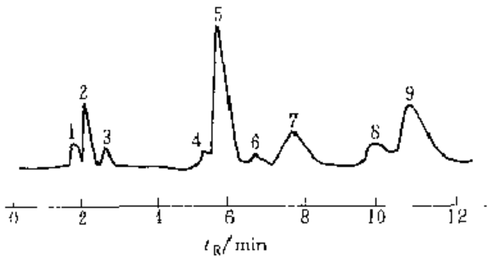
图 33-36　聚四氟乙烯裂解产物[30]

色谱峰：1—六氟乙烷；2—四氟乙烯；3—八氟丙烷；4—三氟甲烷；5—六氟丙烯；6—八氟环丁烷；7—八氟-1-丁烯；8—五氟乙烷；9—八氟异丁烯；10—八氟-1-戊炔；11—未知物；12—十氟-1-己炔；13—十二氟庚炔

色谱柱：6401 硅胶，2m×2mm

柱　温：40℃（2min）→120℃（8min），20℃·min^{-1}

检测器：MS



色谱峰：1—C_2F_4；2—$C_2F_2H_2$；3—C_2F_3H；4—CF_2HCl；5—C_2F_3Cl；6—CF_3Cl；7—C_2FH_2Cl；8—C_2F_4HCl；9—C_3F_5Cl

色谱柱：Porapak Q（80目～100目），2m×2mm

柱　温：90℃

载　气：He，30ml·min^{-1}

检测器：MS

进样方式：在590℃裂解5s

图 33-37　偏氟乙烯与三氟氯乙烯共聚物[29]

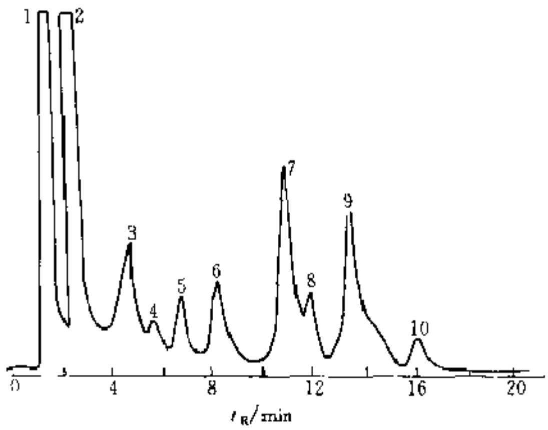


图 33-38　全氟磺酸树脂[31]

色谱峰：1—C_2F_4；2—C_3F_6；3—$CF_2(CF_2)_2CF_2$ 4- CF_2—CF—CF=CF_2；5—$CF_2(CF_2)_3CF_2$；6—CF_2=$CF(CF_2)_4CF_3$；7—$CF_2(CF_2)_4CF_2$；8- $CF_3(CF_2)_3CF$—CF_2；9—$CF_2(CF_2)_5CF_2$；10—C_8F_{16}（$CF_2(CF_2)_6CF_2$）

色谱柱：6402硅胶（60目～80目），2m×3mm

柱　温：50℃→120℃，5℃·min^{-1}

载　气：He，20ml·min^{-1}

检测器：MS

裂解方式：裂解温度700℃、25s



图 33-39　环氧树脂中的氯甲代氧丙环

色谱峰：1—内标物；2—氯甲代氧丙环；3—二甲基甲酰胺

色谱柱：Tenax（60目～80目），2m×3mm

柱　温：150℃

检测器：FID

气化室温度：180℃

检测器温度：180℃

进样方式：顶空法，针150℃、样品70℃

第三节 火炸药色谱图

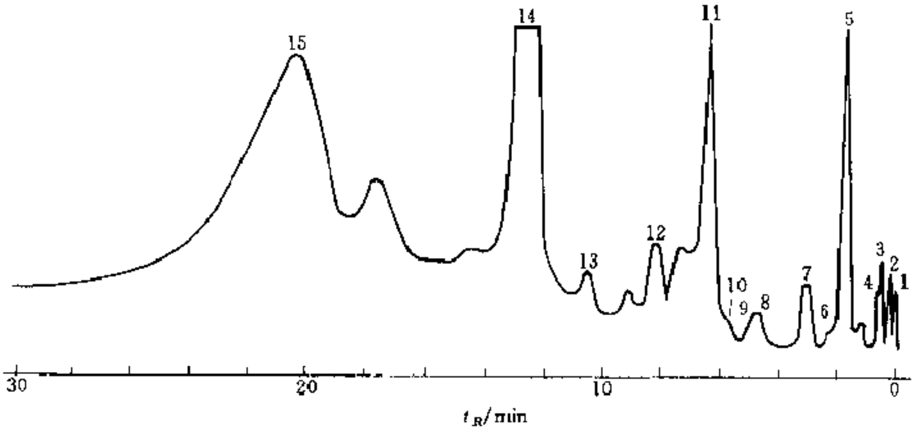


图 33-40 硝酸纤维素[12]

色谱峰：1—一氧化碳；2—甲烷；3—乙烯；4—乙烷；5—丙烯；6—丙烷；7—乙醛；8—正丁烯；9—正丁烷；10—乙腈；11—丙烯醛；12—烯丙醇；13—异丁醛；14—正丁醇；15—2-丙氧基乙醇

色谱柱：Porapak Q（50目～80目），1.52m×4mm

柱 温：100℃→200℃，8℃·min^{-1}

载 气：N_2，60ml·min^{-1}

检测器：FID

裂解器：居里点裂解器（10s）

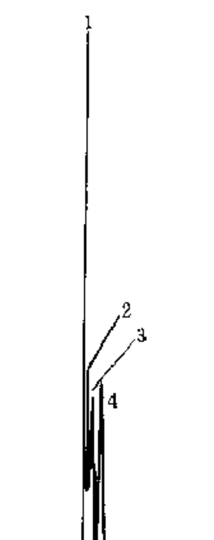


图 33-41 硝化纤维素中聚氨酯热裂解产物[32]

色谱峰：1—$CO+NO+CO_2$；2—HCHO；3—$HCN+H_2O$；4—CH_3CHO；5—C_2H_5CHO；6—CH_3COCH_3；7—$CH_2=CH-CHO$

色谱柱：OV-1，50m×0.28mm　检测器：FID

柱 温：100℃　裂解条件：750℃，5s

载 气：N_2

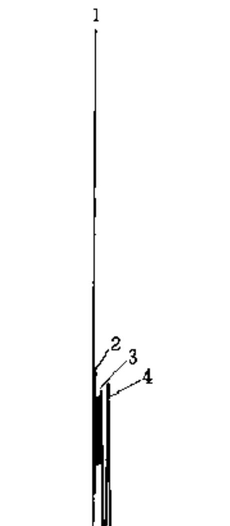


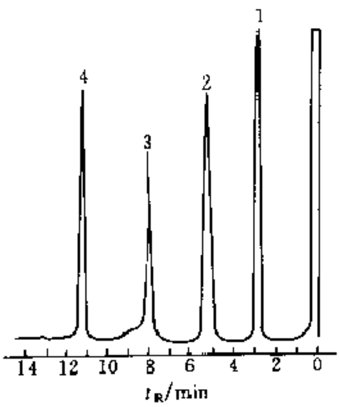
图 33-42 聚氨酯（2%）与硝化纤维素裂解物[28]

色谱峰：1—$CO+NO+CO_2$；2—HCHO；3—$HCN+H_2O$；4—CH_3CHO；5—C_2H_5CHO；6—CH_3COCH_3；7—CH_2=CHCHO

色谱柱：OV-1，50m×0.28mm　载 气：N_2

柱 温：100℃　检测器：FID

裂解器：CDS 150裂解器，丝式探头（裂解温度750℃，时间5s）



色谱峰：1—三醋精；2—硝化甘油；3—间苯二酚；4—2-苯基二苯胺

色谱柱：2.5% OV-17+0.5%EGS+0.25%DS 125，Chromosorb G（100 目～120 目），1m×3.3mm

柱　温：140℃（6min）→210℃，12℃·min^{-1}

载　气：N_2，30ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：150℃

检测器温度：150℃

图 33-43　发射药乙醚萃取液[33]

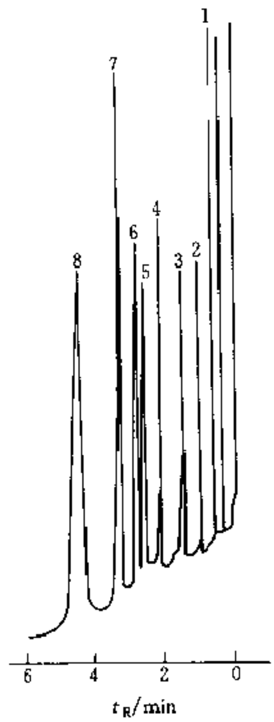


图 33-44　痕量混合炸药[34]

色谱峰：1—硝化二乙二醇；2—硝化甘油；3—气化室污染物；4—三硝基甲苯；5—季戊四醇四硝酸酯；6—黑索金；7—特屈儿；8—奥克托金

色谱柱：OV-101，25m×0.25mm，d_f=0.1μm

柱　温：50℃（1min）→240℃，40℃·min^{-1}

载　气：He，28ml·min^{-1}　　气化室温度：165℃

检测器：ECD　　检测器温度：200℃

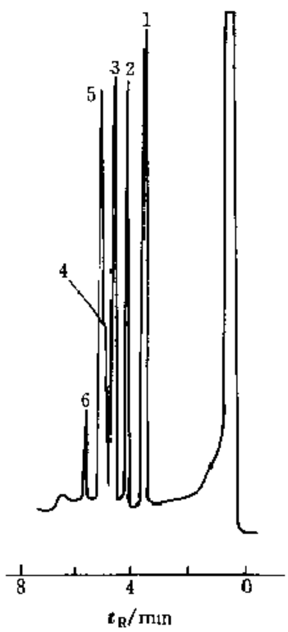


图 33-45　痕量硝化甘油[35]

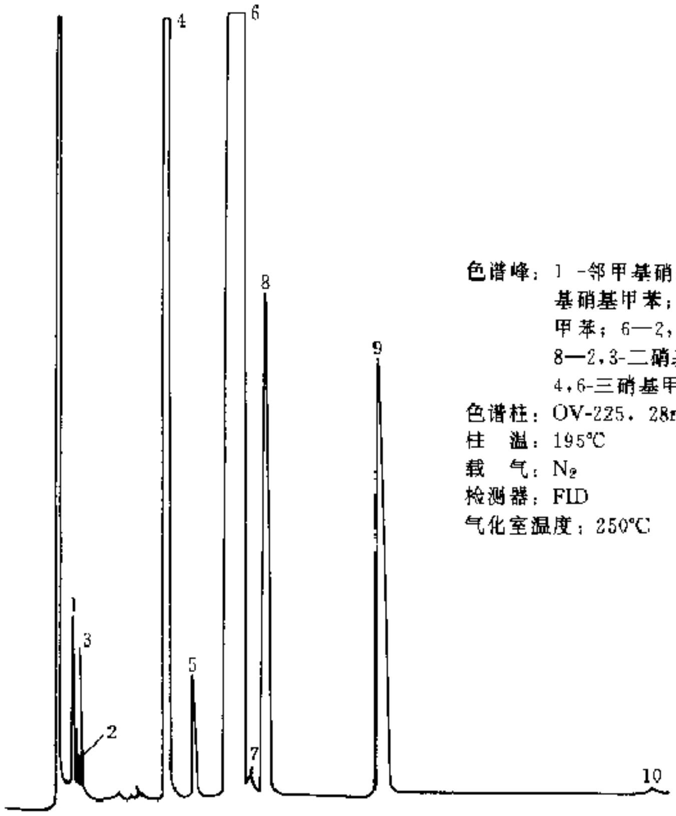
色谱峰：1—硝化甘油；2—2,4-二硝基甲苯；3—三硝基甲苯；4—季戊四醇四硝酸酯；5—黑索金；6—特屈儿

色谱柱：OV-101，25m×0.3mm

柱　温：40℃（1min）→240℃（1min），40℃·min^{-1}

载　气：He，1ml·min^{-1}　　气化室温度：200℃

检测器：热能检测器



色谱峰：1 -邻甲基硝苯甲苯；2—间甲基硝基甲苯；3—对甲基硝基甲苯；4—2,6 二硝基甲苯；5—2,5-二硝基甲苯；6—2,4-二硝基甲苯；7—3,5-二硝基甲苯；8—2,3-二硝基甲苯；9—3,4 二硝基甲苯；10—2,4,6-三硝基甲苯

色谱柱：OV-225，28m×0.27mm

柱　温：195℃

载　气：N_2

检测器：FID

气化室温度：250℃

图 33-46　硝基甲苯[36]

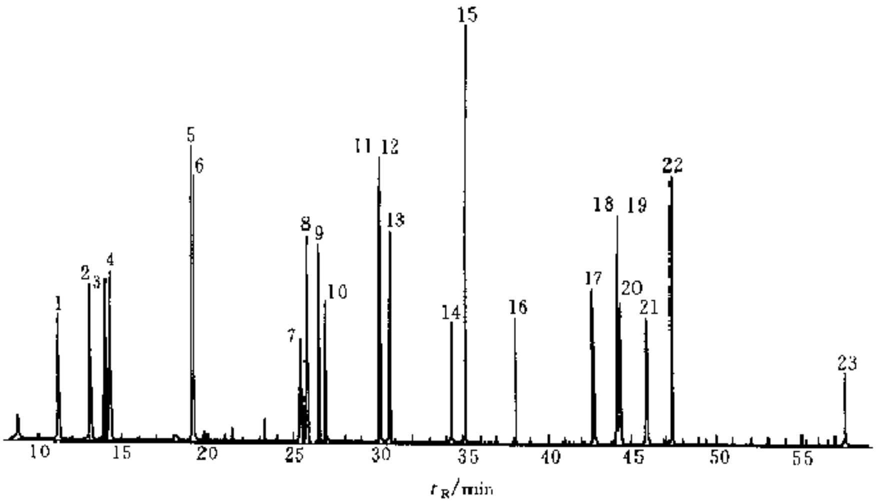


图 33-47　硝基芳烃[37]

色谱峰：1—2 硝基甲苯；2—3-硝基甲苯；3　4-硝基甲苯；4—2,3-二氨基甲苯；5—2,6-二氨基甲苯；6—2,4 二氨基甲苯；7—1,4-二硝基苯；8—2,6-二硝基甲苯；9—2-氨基-6-硝基甲苯；10—1,3-二硝基苯；11—2,4-二硝基甲苯；12—2-氨基-4-硝基甲苯；13—2,3-二硝基甲苯；14—3,4-二硝基甲苯；15—3-硝基联苯；16—2,4,6-三硝基甲苯；17—2,4,5 三硝基甲苯；18—4-氨基-2,6-二硝基甲苯；19—2,3,4-三硝基甲苯；20—1,3-二硝基萘；21—2,6-二氨基-4-硝基甲苯；22—2-氨基-4,6-二硝基甲苯；23—2,2′-二硝基联苯

色谱柱：Rt_x-200，30m×0.25mm，d_f=0.25um

柱　温：80℃（2min）→260℃，3℃·min^{-1}

载　气：He，20cm·s^{-}

检测器：MS

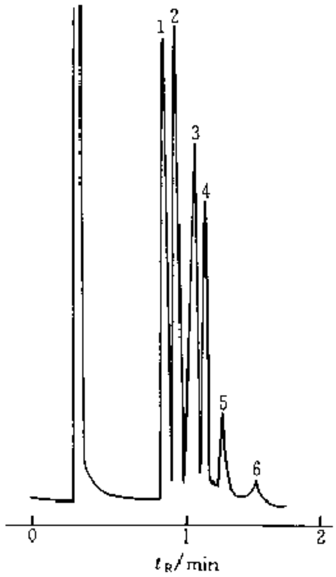


图 33-18　三硝基甲苯异构体[38]

色谱峰：1—2,4,6 三硝基甲苯；2—2,3,6 三硝基甲苯；3—2,3,5-三硝基甲苯；4—2,4,5 三硝基甲苯；5—2,3,4-三硝基甲苯；6—3,4,5 三硝基甲苯

色谱柱：SE-54，10m×0.22mm

柱　温：190℃

载　气：N_2，20cm·s^{-1}

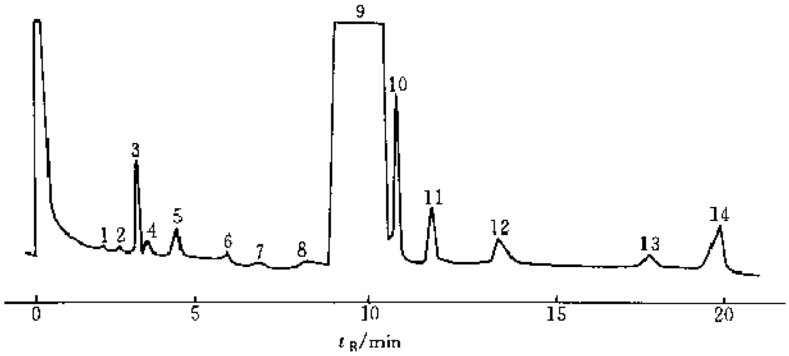


图 33-49　三硝基甲苯中杂质[39]

色谱峰：1—2,6-二硝基甲苯；2—2,5-二硝基甲苯；3—2,4-二硝基甲苯；4—3,5-二硝基甲苯；5—2,3-二硝基甲苯；6—3,4-二硝基甲苯；7—2,4,6-三硝基二甲苯；8—2,4,6-三硝基乙苯；9—2,4,6-三硝基甲苯；10—2,3,6-三硝基甲苯；11—1,3,5-三硝基甲苯；12—2,3,5-三硝基甲苯；13—2,4,5-三硝基甲苯；14—2,3,4-三硝基甲苯

色谱柱：OV-225，20m×0.23mm

柱　温：205℃

载　气：(50～70) ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：250℃

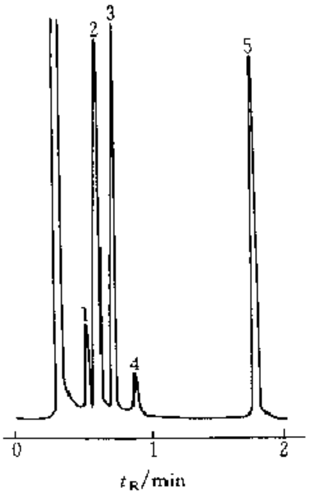


图 33-50　单基火炸药[38]

色谱峰：1—2,6-二硝基甲苯；2—2,4-二硝基甲苯；3—二苯胺；4—2,4,6-三硝基甲苯；5—邻苯二甲酸二丁酯

色谱柱：SE-54，10m×0.22mm

柱　温：190℃

载　气：N_2，44cm·s^{-1}

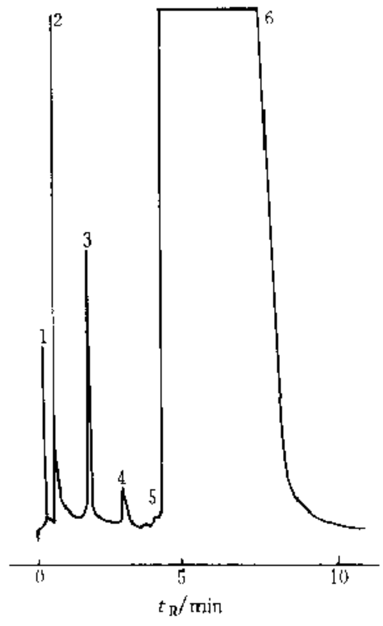


图 33-51　单基发射药中挥发分[39]

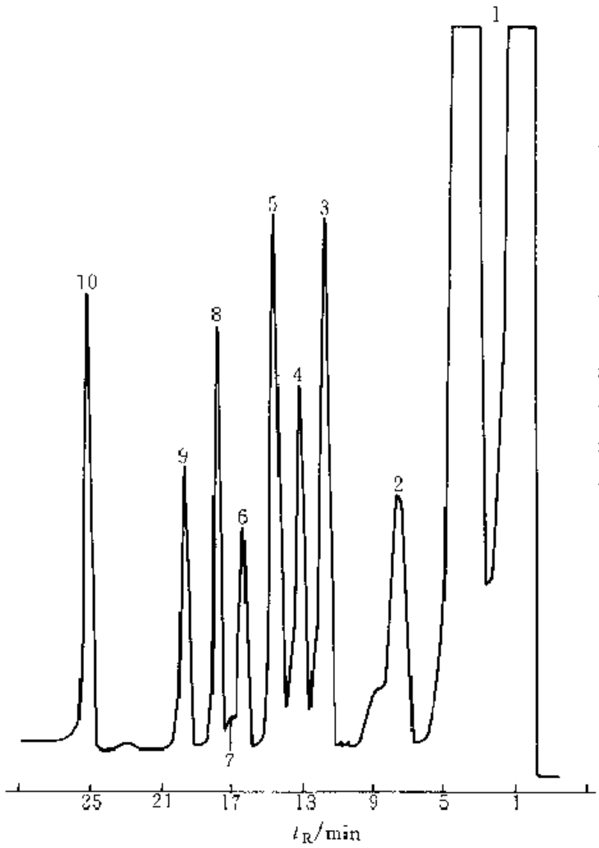
色谱峰：1—空气；2—水；3—乙醇；4—乙醚；5—杂质；6—溶剂（丁酮和仲丁醇）

色谱柱：GDX-101（60 目～80 目），2m×3mm

柱　温：150℃

载　气：H_2，60ml·min^{-1}　　气化室温度：170℃

检测器：TCD　　检测器温度：180℃



色谱峰：1--溶剂；2 甘油-硝酸酯；3—1,2-二硝基甘油；4 间苯二酚；5—1,3-二硝基甘油；6—甘油三乙酸酯；7—硝化甘油；8—邻苯二甲酸二甲酯（内标物）；9 癸二酸二甲酯；10—2-硝基二苯胺

色谱柱：2.5% OV-17+2.5% QF-1，Gas Chrom Q（60 目～80 目），1.83m×3.3mm

柱　温：70℃→230℃，10℃·min^{-1}

载　气：He，65ml·mu.$^{-1}$

检测器：FID

气化室温度：70℃

检测器温度：250℃

图 33-52　火箭推进剂萃取液（BSA 衍生物）[40]

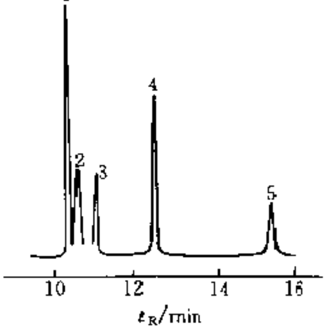


图 33-53　硝基氨基甲苯[28]

色谱峰：1—2-氨基-3-硝基甲苯；2—3-氨基-4-硝基甲苯；3 - 2-氨基-4-硝基甲苯；4—2 硝基-4-氨基甲苯；5—2-氨基-5-硝基甲苯

色谱柱：SE-54，10m×0.22mm

柱　温：193℃

载　气：N_2，29cm·s^{-1}

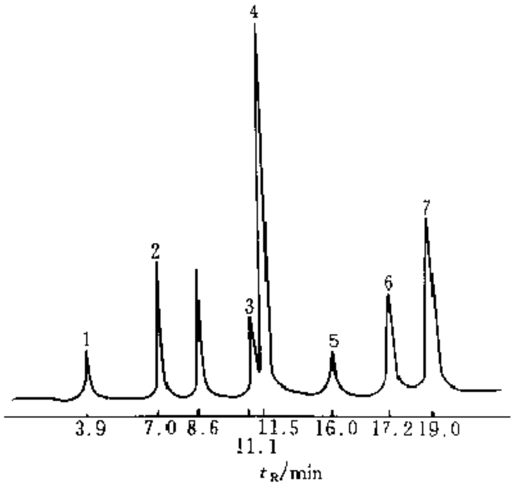


图 33-54　二乙基中定剂分解产物[42]

色谱峰：1—*N*-乙基苯胺；2—2-硝基-乙基苯胺；3—4 硝基-乙基苯胺；4—中定剂；5—2,4-硝基-乙基苯胺；6—2 硝基中定剂；7—4-硝基-中定剂

色谱柱：2.75% OV-17+0.5% PMPE，Chromosorb G（8(目～100 目），2m×3.3mm

柱　温：150℃（1min）→250℃，8℃·min

载　气：N_2，30ml·min^{-1}　　气化室温度：250℃

检测器：NPD　　检测器温度：280℃

第四节　其他色谱图

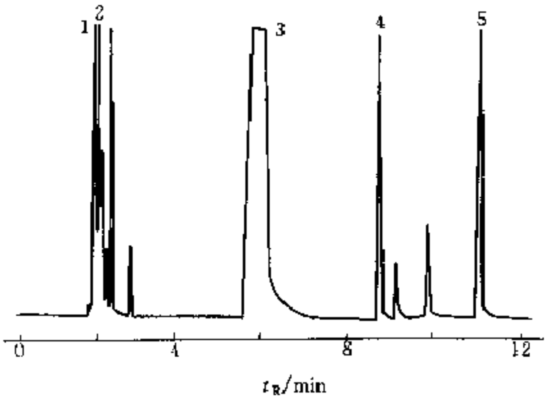


图 33-55　二茂铁电解液[43]

色谱峰：1—环戊二烯；2—环戊烯；3—二甲基甲酰胺；4—双环戊二烯；5—二茂铁

色谱柱：SE-54，27m×0.25mm

柱　温：40℃（4min）→250℃，30℃·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：260℃

检测器温度：260℃

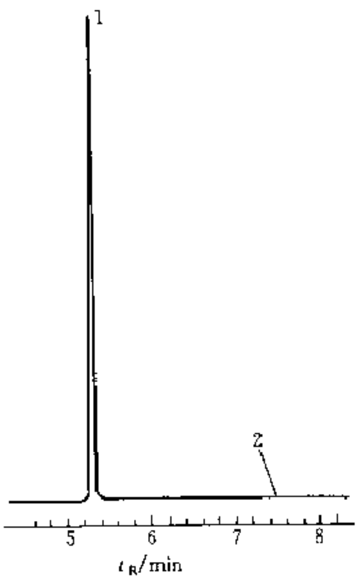


图 33-56　二茂铁（一）[44]

色谱峰：1—二茂铁（75pg Fe）；2—正十六烷（350ng）

色谱柱：DB1，15m×0.53mm，d_f=0.15μm

柱　温：50℃（2min）→210℃，20℃·min^{-1}

载　气：He

检测器：原子发射检测器（302.1nm）

进样方式：柱头进样，程序升温气化（高于炉温3℃）

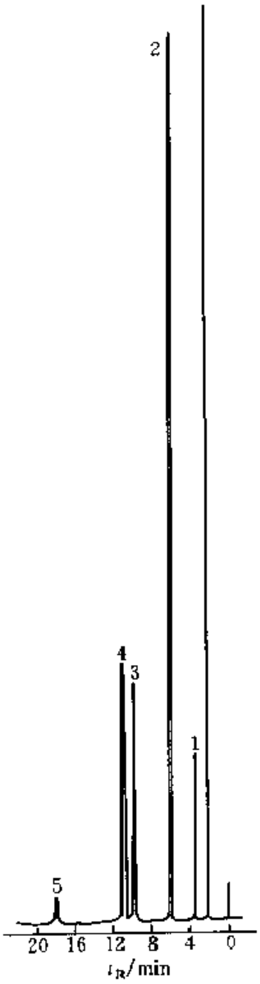


图 33-57　二茂铁（二）[45]

色谱峰：1—二茂铁；2—一叔丁基二茂铁；3,4—二叔丁基二茂铁；5—三叔丁基二茂铁

色谱柱：OV-101，21m×0.25mm

柱　温：168℃

载　气：N_2，17.5cm·s^{-1}

检测器：FID

气化室温度：245℃

检测器温度：245℃

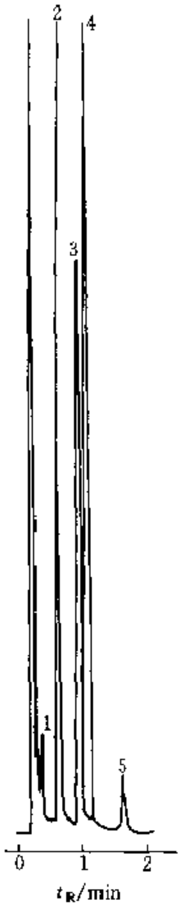


图 33-58 叔丁基二茂铁[28]

色谱峰：1—二茂铁；2—叔丁基二茂铁；3—二叔丁基二茂铁Ⅰ；4—二叔丁基二茂铁Ⅱ；5—三叔丁基二茂铁

色谱柱：SE-54，10m×0.22mm

柱　温：190℃

载　气：N_2，20cm·s^{-1}

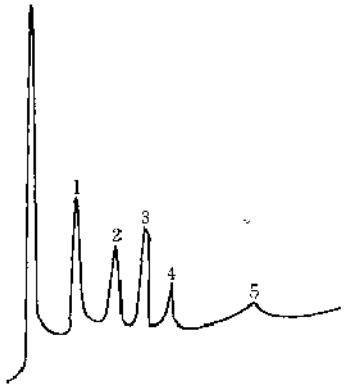


图 33-59 辛基二茂铁[46]

色谱峰：1—十八烷（内标物）；2—α-正丙基戊基二茂铁；3—α-乙基己基二茂铁；4—α-甲基庚基二茂铁；5—二辛基二茂铁

色谱柱：OV-7，Chromosorb W

柱　温：134℃→230℃，3℃·min^{-1}→240℃，9℃·min^{-1}

载　气：He，20ml·min^{-1}

检测器：MS

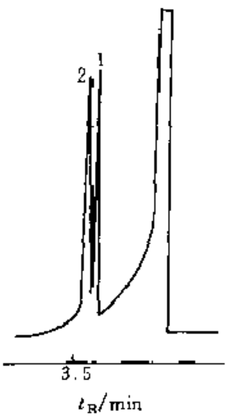


图 33-60 稻显纹纵卷叶螟性诱剂[47]

色谱峰：1—反-7,11-十六碳二烯醇乙酸酯；2—顺-7,11-十六碳二烯醇乙酸酯

色谱柱：1% XE-60 SCOT 柱，30m

柱　温：204℃

检测器：FID

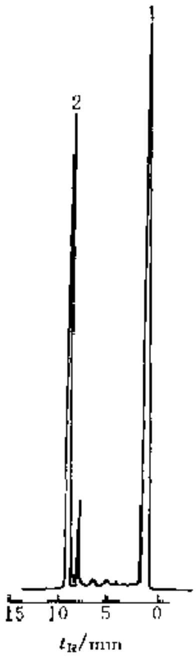


图 33-61 玉米螟信息素[48]

色谱峰：1—$CH_3C(H)=C(H)(CH_2)_{10}CH_2OAc$（两个 H 均在下方）；

2—$CH_3C(H)=C(H)(CH_2)_{10}CH_2OAc$（一个 H 在上方，一个 H 在下方）

色谱柱：OV 210，15.5m×0.2mm

柱　温：170℃

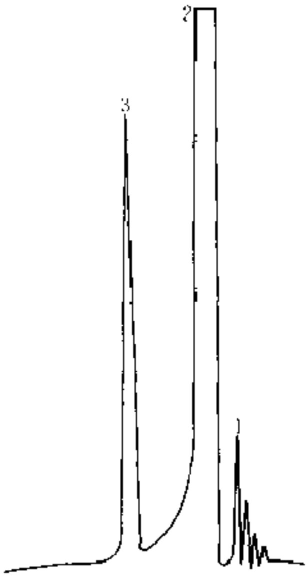


图 33-62 工业乙酸锑[40]

色谱峰：1—C_5～C_6烷烯烃；2—苯；3—甲苯

色谱柱：有机皂土＋苯二甲酸二壬酯＋6201担体质量比为3：25：100，3m×4mm

柱　温：90℃

载　气：N_2，40ml·min^{-1}

检测器：FID

气化室温度：200℃

检测器温度：180℃

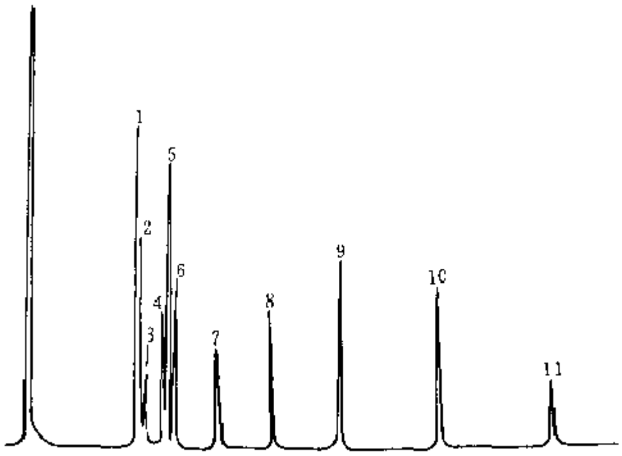


图 33-63 9-烃基咔唑[30]

色谱峰：1—9-乙烯咔唑；2—9-甲基咔唑；3—9-乙基咔唑；4—9-异丙基咔唑；5—9-烯丙基咔唑；6—9-丙基咔唑；7—9-丁基咔唑；8—9-戊基咔唑；9—9-己基咔唑；10—9-庚基咔唑；11—9-苄基咔唑

色谱柱：OV-101空心柱，37m

柱　温：230℃

载　气：N_2

检测器：FID

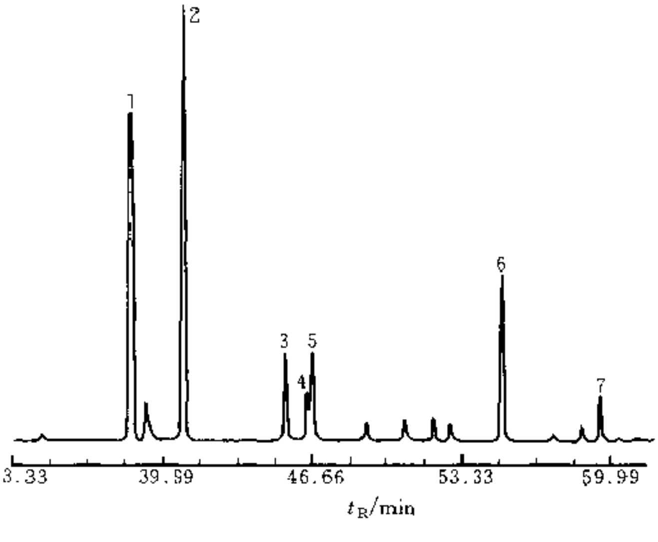


图 33-64 正庚烷冷火焰产物[32]

色谱峰：1—反-2-甲基-5-乙基四氢呋喃；2—顺-2-甲基-5-乙基四氢呋喃；3—反-2-甲基-4-丙基环氧丙烷；4—2,4-二乙基环氧丙烷；5—顺-2-甲基-4-丙基环氧丙烷；6—2-丙基四氢呋喃；7—2-庚酮

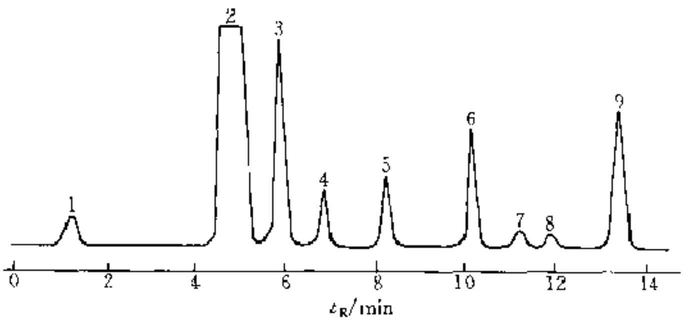
色谱柱：CP-Si 5B，25m×0.32mm，d_f＝1.2μm＋DB5，30m×0.32mm，d_f＝1μm

柱　温：40℃（30min）→160℃，1℃·min^{-1}→200℃，快速升温

载　气：He，1.2ml·min^{-1}

检测器：MS

气化室温度：250℃



色谱峰：1—H_2；2—N_2；3—O_2；4—CO；5—CH_4；6—CO_2；7—C_2H_4；8—C_2H_6；9—H_2O

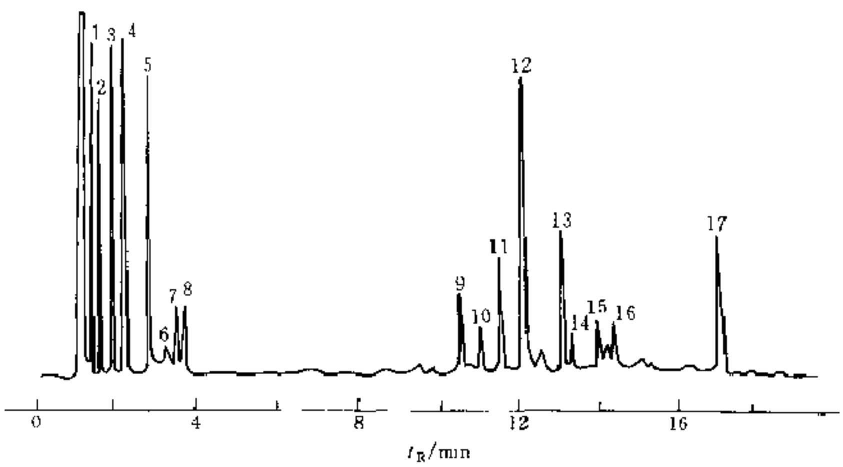
色谱柱：Porapak Q，2.5m×4mm

柱　温：-99°C（4min）→250°C（8min），30°C·min^{-1}

载　气：He，30ml·min^{-1}

检测器：TCD

图 33-65　空气与甲烷燃烧气[51]



色谱峰：1—苯；2—甲基环己烷；3—甲苯；4—3-己烯-2-酮；5—4-羟基-2-戊酮；6—乙苯；7—异丙苯；8—异丙基环己烷；9—二苯乙烷；10—芴；11—1,3-二苯丙烷；12—二聚苯乙烯；13—二苯乙炔；14—2-苯基萘；15—1-苯基茚；16—1,3-二苯基丁烯炔；17—苯乙基苯甲腈

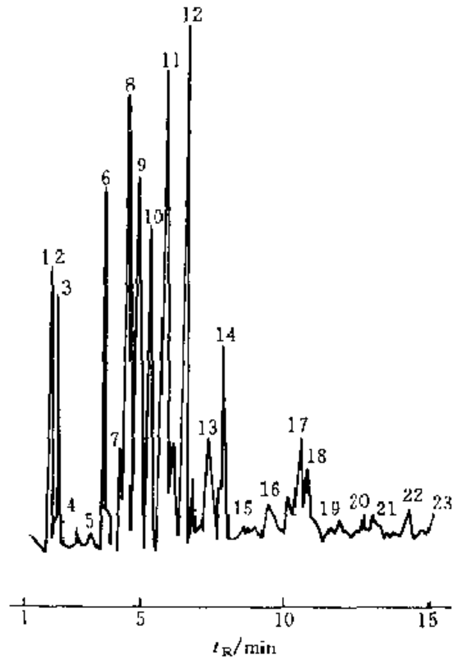
色谱柱：SE-52，25m×0.25mm

柱　温：55°C（2min）→250°C，15°C·min^{-1}

载　气：N_2

检测器：FID

图 33-66　聚苯乙烯塑料燃烧烟雾焦油[53]



色谱峰：1—乙醇；2—三氯甲烷；3—四氯化碳；4—1,2-乙二醇；5—甲基吡啶；6—苯酚；7—缩乙二醇；8—2-甲基苯酚；9—4-甲基苯酚；10—2,6-二甲基苯酚；11—2,4-二甲基苯酚；12—2,4,6-三甲基苯酚；13—4-甲基异氰酸苯酯；14—3-甲基-1,2,3,4-四氢喹啉；15—2,3,5,6-四甲基苯酚；16—5,8-二甲基喹啉；17—2-甲基异氰酸苯酯；18—4-甲氧基苯乙腈；19—9*H*-芴；20—3-甲基-1(3′-甲基-亚甲基)苯；21—4-甲基氧芴；22—9*H*-咕吨；23—2-苯甲基苯酚

色谱柱：SE-31，50m×0.25mm

柱　温：120°C→195°C，10°C·min^{-1}

载　气：He

检测器：MS

气化室温度：280°C

图 33-67　切花泥裂解产物[54]

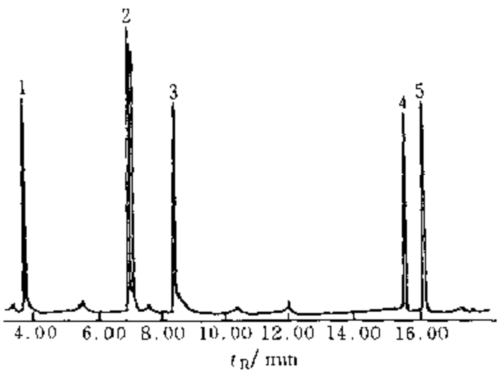


图 33-68 含磷毒剂[55]

色谱峰：1—沙林；2—梭曼；3—塔崩；4—$C_{11}H_{26}NO_2PS$；5—磷酸二丁酯

色谱柱：HP-5，25m×0.2mm，d_f=0.32μm

柱 温：40℃（1min）→280℃（5min），10℃·min⁻¹

载 气：He，0.5ml·mim⁻¹

检测器：MS

气化室温度：250℃

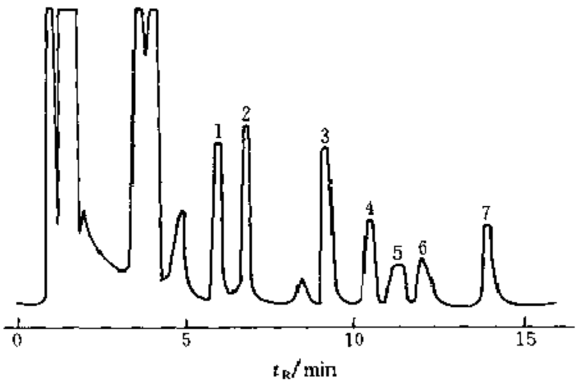


图 33-69 部分无机酸的阴离子（TMS 衍生物）[56]

色谱峰：1—亚磷酸盐；2—碳酸盐；3—草酸盐；4—硫酸盐；5—钒酸盐；6—磷酸盐；7—砷酸盐

色谱柱：3% OV 17，Chromosorb W HP（80 目～100 目），3.65m×6mm

柱 温：70℃→105℃，5℃·min⁻¹

载 气：He，80ml·mim⁻¹

检测器：FID

参 考 文 献

1 Alltech. Chromatogrcaphy Catalog 350，1995；159

2 Ettre L S，McClure G L，Walters J D. Chromatographia，1983；17：560

3 Radell E. A，Rea D F. HRC & CC，1983；6：189

4 Steenackers D. Sandra P. HRC，1995；18：77

5 Kersten B S. J Chromatographia，1992；50：115

6 Rastogi S C. Chromatographia. 1993；37：211

7 Supelco Inc. Catalog 21：31

8 Shimadzu Application News. CA 180-306

9 J & W Scientific，1994-1995 Chromatography Catalog & Reference Guide. 1995；195

10 Fabbri A. Cresentini G. Mangani F. et al. Chromatographia. 1987；23：856

11 Raynor M W，Waring R M. Davies I L. J Chrom Sci，1987：25：104

12 May R W，Pearson E F，Scothern D. Pyrolysis Gas Chromatography. London：Chem Soc，1997：90～106

13 吴靖嘉，李兆琳，韩敦渊等. 色谱，1986：4：249

14 Orav A，Kuningas K，Koplinets E et al. Chromatographia，1993：37：259

15 Anders G. Anders K，Engewald W. Chromatographia，1985；20：82

16 岛津. Gas Chromatograph Data Sheet，CA 180-919

17 Tsuge S，Okumoto T，Takeuchi T. J Chrom Sci，1969；7：250

18 Oguri N，Onishi A，Hanai T. HRC，1991；14：19

19 徐正炎，张蓍. 色谱，1992；10：293

20 Shapi M M，Hesso A. J Chromatogr，1991；562：681

21 Mori S，Furusawa M，Takeuchi T. Anal Chem，1970；42：959

22 GB 12005.5-89. 中国国家标准汇编，1993；147：672

23 Takeuchi T, Tsuge S, Okumoto T. J Gas Chrom, 1968; 6: 542
24 徐正炎. 色谱, 1993; 11: 225
25 Oguchi R, Shimizu A, Yamashita S, et al. HRC, 1991; 14: 412
26 李培基, 李铁烽 分析化学, 1981; 9: 42
27 李培基, 上瑛. 分析化学, 1985; 13: 721
28 傅若农, 刘虎威. 高分辨气相色谱及高分辨裂解气相色谱. 北京: 北京理工大学出版社, 1992; 340~400
29 吴经玲, 姜龙飞, 薛树满. 第五次全国色谱学术报告会文集, 1985: 622
30 舒敬植. 第五次全国色谱学术报告会文集, 1985: 626
31 舒敬植, 高养馨, 成为宏. 分析测试通报, 1989; 8(1):32
32 Williams A F. Talanta, 1963; 10: 956
33 Sopranetti A, Reich H V. Explosivstoffe, 1972; 20: 197
34 Douse J M F. J Chromatogr, 1981; 208: 83
35 Douse J M F. J Chromatogr, 1983; 256: 359
36 孟麟珍, 周淑文. 全国第二届毛细管色谱报告会文集, 1984: 214
37 J Chrom Sci, 1993; 31: 387
38 傅若农. 色谱, 1992; 10: 41
39 孟麟珍, 张丽君, 未秀英. 第五次全国色谱学术报告会文集, 1985: 208
40 邓魏, 孙敏庆. 色谱, 1992; 10: 174
41 Trowell J M. Anal Chem, 1970; 42: 1440
42 周申范, 宋敬埔, 于乃岩. 色谱理论及应用. 北京: 北京理工大学出版社, 1994; 376
43 赵计梅, 孙爱侠, 吕艳. 色谱, 1993; 11: 257
44 Quimby B D, Dryden P C, Sullivan J J. HRC, 1991; 14: 110
45 北京分析仪器厂. 北京分析, No. 12
46 张爱科, 陈淑范, 王维宜. 第八次全国色谱学术报告会文集, 1991: 289
47 康星武, 翟冬宵. 分析化学, 1982; 10: 237
48 曾昭睿, 吴采樱, 历豹仙. 分析化学, 1992; 20: 1349
49 HG/T 2033—91
50 陈秀馨, 王玉霞, 陈为通. 分析化学, 1985; 13: 514
51 张兴汯. 分析化学, 1995: 23: 456
52 Dagaut P, Reuillon M, Cathonnet M, et al. Chromatographia, 1955; 40: 147
53 吴保国, 杨明非, 刘贵生等. 色谱, 1993; 11: 223
54 余益民, 李怡萍, 刘淑莹等. 分析化学, 1996: 24: 1204
55 顾惠芬, 周黎明, 蔡冠梁等. 色谱, 1996; 14: 42
56 Butts W C, Rainez W T. Anal Chem, 1971; 43: 538

（李浩春　李全洪）

附　　录

一、部分国外商品色谱柱及固定液

（一）国外部分商品空心柱使用的固定液

固定液名 \ 柱名 \ 供应者	Alltech	Chrompack	Hewlett-Packard	J&W	Quadrex	Restek	SGE	Supelco	岛津
聚二甲基硅氧烷	AT-1	CP-Sil 5 CB	HP-1，Ultra-1	DB-1，DB-1ht	007-1，1HT	Rtx 1	BP1	SPB 1 MDN-1	CBJ1
聚（5%苯基）二甲基硅氧烷	AT 5	CP Sil 8 CB	HP 5，Ultra-5	DB-5，DB 5ht，DB 5ms	007-2，2HT	Rtx 5，XTI-5	BP5	SPB-5，MDN 5，MDN 5s	CBJ5
聚（10%苯基）-二甲基硅氧烷					007-3				
聚（14%苯基）-二甲基硅氧烷		CP Sil 13 CB							
聚（20%苯基）-二甲基硅氧烷	AT-20				007-7	Rtx-20		SPB 20	
聚（35%苯基）-二甲基硅氧烷	AT 35		HP 35	DB-35	007-11	Rtx-35	BPX 35	SPB 35，MDN-35	
聚（50%苯基）-二甲基硅氧烷	AT-50		HP 17，HP-50	DB-17，DB-17ht	007 17，50HT	Rtx-50		SPB-50	CBJ17
聚（65%苯基）-二甲基硅氧烷					65HT	Rtx 65			
聚（5%苯基），（碳硼烷）-二甲基硅氧烷							HT5		
聚（8%苯基），（碳硼烷）-二甲基硅氧烷							HT8		
聚三氟丙基甲基硅氧烷	AT-210			DB 210	007-210	Rtx-200			CBJ210
聚氰丙基甲基硅氧烷				DB-23					
聚（6%氰丙基苯基）-二甲基硅氧烷	AT 1301		HP 1301	DB-1301	007-1301	Rtx 1301			
聚（14%氰丙基苯基）-二甲基硅氧烷	AT-1701		HP-1701	DB-1701	007 1701	Rtx-1701	BP10	SPB-1701	
聚（50%氰丙基苯基）-二甲基硅氧烷	AT-225		HP-225	DB 225			BP225		
聚（7%氰丙基甲基），（7%苯基甲基）-二甲基硅氧烷		CP-Sil 19 CB							
聚（25%氰丙基甲基），（25%苯基甲基）-二甲基硅氧烷		CP Sil 43 CB			007-225				
聚（50%氰丙基甲基）-苯基甲基硅氧烷						Rtx 225			
聚乙二醇 20M	AT-WAX	CP-Wax 52 CB，CP Wax 57 CB	HP INNO Wax	DB Wax	007 CW	Stabilwax	BP 20	Supelcowax 10	
硝基对苯二酸处理的聚乙二醇-20M	AT 1000	CP-Wax 58 CB	HP-FFAP	DB FFAP	007-FFAP	Stabilwax-DA	BP 21	Nukol	
碱脱活的聚乙二醇 20M				CAM		Stabilwax DB			
聚烯化乙二醇								PAG	

（二）选择性相似的填充柱与商品空心柱

填充柱	空心柱								
	Alltech	Chrompack	Hewlett-Packard	J&W	Perkin-Elmer	Quadrex	Restek	SEG	Supelco
OV-1、OV-101、SE-30、DC 200、DC-101、SF-96、UC W982	AT-1、RSL-150、RSL-160	CP Sil 5 CB、CP-Sil 5、Squalane	HP-1、HP-101、Ultra 1	DB-1、DB-1ht	PE-1	007-1、1HT	Rtx-1	BP1	SPB-1、SP-2100
SE-52、OV-3、OV-5、OV-73、DC-480、Fluorolube、Dexsil 300	AT-5、RSL-200	CP Sil 8 CB、CP-Sil 8	HP-5、HP-5ms、Ultra-2	DB-5、DB-5ms、DB-5ht、DB-5.625、DB-608	PE-5	007-2、2HT	Rtx-5、XTI-5	BP5、BPX5	SPB-5
OV-7、DC 550、Dexsil 400	AT-20					007-7	Rtx-20		SPB-20
OV-11	AT-35、RSL-300		HP-35	DB-35		007-11	Rtx-35	BPX 35	SPB-35
SE-54、OV-17、OV-22、OV-25、DC-704、DC-710	AT-50		HP-50、HP-17	DB-17、DB-17ht		007-17、50HT	Rtx-50		SPB-50、SP-2250
OV-1701	AT-170	CP-Sil 19 CB	HP-1701	DB-1701	PE-1701	007-1701	Rtx-1701	BP-10	SPB-7、SPB-1701
QF-1、OV-202、OV-210、OV-215	AT-210、RSL-400			DB-210		007-210	Rtx-200		SP-2401
OV-1301	AT-1301		HP-1301	DB-1301		007-1301	Rtx-1301		
Silar 5 CP、OV-225	AT-225、RSL-500	CP-Sil 43CB、CP-Sil 58	HP-225	DB-225	PE-225	007-225	Rtx-225	BP-15、BP-225	SP-2300
Silar 7 CP		CP-Sil 76			PE-CPS-1	007-CPS-1	Rtx-70	BPX-70	SP-2310
Silar 9 CP	RSL-1000	CP-Sil 84		DB-23		007-23	Rtx-2330		SP-2330
Silar 10 CP、OV-275		CP-Sil 88					Rtx-2340		SP-2340
Carbowax 20M、SUPEROX、SWPELCOWAX	AT-WAX、Superox II、RSL-310	CP-WAX 52 CB、CP-WAX 57 CB、CP-WAX 51	HP-20M、HP-Inno-Wax	DB-WAX	PE-CW	007-CW	Stabilwax	BP-20	Supelcowax-10
FFAP、OV-351	AT-1000、Superox FA	CP-WAX 58 CB	HP-FFAP	DB-FFAP	PE-FFAP	007-FFAP	Stabilwax DA	BP-21	Nukol、SP-1000
Pluronic F 86									PAG

（三）专用的商品空心柱

柱名 供应者 / 应用范围	Alltech	Chrompack	Hewlett packard	J&W	Quadrex	Restek	SGE	Supelco	岛津
低沸程烃类	AT Petro		PONA		007-1 30 0.5F		PONA	Petrocol DH	
高沸点烃类，高温化合物					1HT，2HT	XT1-5	HT-8	SPB-1Thin Film	CBN1，CBN17
多环芳烃		CP-Sil PAHCB					MDN-12		
烃类族分析	AT-Petro	CP-Sil PONA CB	HP-PONA	DB-Petro 100	007-7-100-0.5F		BP1-PONA	Petrocol DH	
模拟蒸馏 ASTM D3710	AT-3710		HP D3710		007-1-10V-5.0F			Petrocol 3710	
模拟蒸馏 ASTM D2887	AT-2887	SimDist CB	HP D2887	DB 2887	007-1-10V-1.0F	Rt_x-2887	HT-5	Petrocol2887，及 EX2887	
酸性化合物						Stabilwax DA			
碱性化合物		CP-Wax 51		CAM		Stabilwax DB		Carbowax Amine	
硫化合物	AT-Sulfur		HP-Sulfur					SPB 1 Sulfur	
脂肪酸甲酯		FFAP CB						Omegamax 250，及 320	
脂肪酸甲酯	AT-Silar			DB 23			BPX 70	SP 2560，SP-2330	
甾族化合物						Rt_x-50		SAC-5	
US EPA 502.2，524.2，624	AT 502.2，AT-624	CP-Sil 13 CB	HP-VOC，HP-624	DB-VRX，DB 502.2，DB-624	007-624，007 502.2	Rt_x-502.2，Rt_x-624，Rt_x-Volatiles	BP624	VOCOL	CBJ624
US EPA 625，1625，8270			HP-5ms	DB-5 ms，DB-5.625		XT1-5	BPX 5，BPX 625	PTE-5，及 PTE-5QTM	
US EPA 508，608，多氯联苯	AT-Pesticide	CP-Sil 8 CB	HP-608	DB 608	007-608		BP608 MDN-12	SPB-608	CBJ608
含氮除草剂				DB-35		Rt_x-35		Sup-Herb	
甘油三酸酯		TAP CB，及 HT TAP CB		DB 17ht		Rt_x 65GT			
四氯二苯并对二噁英异构体		CP-Sil 88		DB-Dioxin	007 Dioxin			SP-2331	
对映体化合物	Chirasil-Val	Chirasil-Val						α-DEX 120	
对映体化合物				Cyclodex-B		Rt βDEX_m	Cydex B	β-DEX110，及 120	
气体烃	AT Alumina	Al_2O_3/KCl，Al_2O_3/Na_2SO_4	HP-Al_2O_3/KCl	GS Q，GS Alumina		Rt-Alumina PLOT		Petrocol DH 50.2 及 DH 150	CBJ GSQ
惰性气体，六氟化硫	AT Mol Sieve	Carbo PLOT P7		GS-Molesieve	Mol Sieve 5A	Rt-Msieve 13X PLOT			

二、国家标准中气相色谱试验方法题目汇编

在中华人民共和国国家标准中，有许多用气相色谱法作为试验方法的标准，此附录中按发布的编号顺序，将1993年前这些标准的编号与题目名汇编。国家标准在不断地修订中，编号中以GB/T开头的标准则是经审订改为行业标准者。

编　号	题　目　名
GB 338—85	工业甲醇
GB 684—86	化学试剂　甲苯
GB/T 1751—92	稀释剂、防潮剂水分测定法
GB 2366—86	化工产品中水分含量的测定
GB 2548—81	敌敌畏乳油
GB 2549—81	敌敌畏原油
GB 2601—81	酚类产品组成的气相色谱法测定方法
GB 2604—81	邻甲酚组成的气相色谱测定方法
GB 3144—82	甲苯中烃类杂质的气相色谱测定法
GB/T 3391—91	工业用乙烯中烃类杂质的测定
GB/T 3392—91	工业用丙烯中烃类杂质的测定
GB 3393—82	聚合级乙烯、丙烯中微量氢的测定
GB 3394—82	聚合级乙烯、丙烯中微量一氧化碳、二氧化碳的测定
GB 3395—82	聚合级乙烯中微量乙炔的测定
GB 3704—83	煤焦油萘含量气相色谱测定方法
GB 3724—83	甲胺磷原油分析方法
GB 3726—83	甲胺磷乳油
GB 4117—92	工业二氯甲烷
GB 4118—92	工业三氯甲烷
GB 4322—84	纯吡啶中吡啶含量的气相色谱测定方法
GB 4614—84	用气相色谱法测定聚苯乙烯中残留的苯乙烯单体
GB 4651—84	磷胺原油分析方法
GB 4698.15—84	钛及钛合金化学分析方法·真空加热气相色谱法测定氢量
GB 4919—85	工业废水中总硝基化合物的测定
GB 5009.19—85	食品中六六六、滴滴涕残留量的测定方法
GB 5009.20—85	食品中有机磷农药残留量的测定方法
GB 5009.23—85	食品中黄曲霉毒素B_1、B_2、G_1、G_2的测定方法
GB 5009.29—85	食品中山梨酸、苯甲酸的测定方法
GB 5830—86	纯氮及纯氩检验方法
GB 6013—85	工业用丁二烯纯度的测定
GB 6015—85	工业用丁二烯中微量乙腈和二聚物的测定
GB 6017—85	工业用丁二烯中烃类杂质的测定
GB 6021—85	工业用丁二烯液上气相中氧和氮的测定
GB 6022—85	工业用丁二烯液上气相中氧的测定
GB 6024—85	工业用丁二烯中丁二烯纯度及烃类杂质的测定
GB 6026—89	工业丙酮
GB 6028—85	硫化橡胶中聚合物的鉴定
GB 6690—86	工业用裂解碳四的组成测定
GB 6390—86	久效磷含量分析方法
GB 6394—86	氰戊菊酯原药
GB 6395—86	20%氰戊菊酯乳油
GB 6696—86	氧乐果含量分析方法
GB 6698—86	乙酰甲胺磷原药含量分析方法
GB 6704—86	工业甲基萘中甲基萘、萘含量的气相色谱测定方法
GB 6817—92	对硝基氯苯
GB 7131—86	裂解气相色谱法鉴定聚合物
GB 7370—92	对氯基苯甲醚
GB 7375—87	工业用氯代甲烷类纯度的测定
GB 7492—87	水质　六六六、滴滴涕的测定
GB 7601—87	运行中变压器油水分测定法
GB 7715—87	工业用乙烯
GB 7716—87	工业用丙烯
GB 7717.7—87	丙烯腈中水含量测定
GB 7717.12—87	丙烯腈中乙腈、丙酮和丙烯醛含量测定
GB 7814—87	异丙醇
GB 8038—87	焦化甲苯中烃类杂质的气相色谱测定方法
GB 8120—87	高纯正庚烷和异辛烷纯度测定法
GB 8199—87	哒嗪硫磷含量分析方法
GB 8202—87	双甲脒含量分析方法
GB 8203—87	苯菌与来酰肼含量分析方法
GB 8204—87	喹硫磷原药分析方法
GB 8205—87	二氯菊酰氯含量分析方法
GB 8206—87	稻瘟净含量分析方法
GB 8229—87	工业用乙苯纯度及烃类杂质的测定
GB 8339.7—88	钒化学分析方法　脉冲熔融-气相色谱法测定氧量
GB 8661—88	用气相色谱法测定丙烯腈-丁二烯-苯乙烯(ABS)树脂中残留丙烯腈单体含量
GB 8972—88	水质　五氯酚的测定
GB 8981—88	气体中微量氢的测定

续表

编　号	题　目　名	编　号	题　目　名
GB 8984—88	气体中一氧化碳、二氧化碳和甲烷的测定	GB 11734—89	居住区大气中甲基-1605卫生检验标准方法
GB 8985—88	气体中一氧化碳、二氧化碳和碳氢化合物总含量的测定	GB 11737—89	居住区大气中苯、甲苯和二甲苯卫生检验标准方法
GB 9010—88	工业甲胺水溶液试验方法	GB 11738—89	居住区大气中甲醇、丙酮卫生检验标准方法
GB 9016—88	四氟乙烯用二氟一氯甲烷	GB 11741—89	居住区大气中二硫化碳卫生检验标准方法
GB 9017—88	二氟一氯甲烷	GB 11890—89	水质　苯系物的测定
GB 9335—88	硝基苯	GB 11934—89	水源水中乙醛、丙烯醛卫生检验标准方法
GB 9353—88	用气相色谱法测定丙烯腈-丁二烯-苯乙烯(ABS)树脂中残留苯乙烯单体	GB 11935—89	水源水中氯丁二烯卫生检验标准方法
GB 9548—88	甲基对硫磷原药	GB 11936—89	水源水中内烯酰胺卫生检验标准方法
GB 9549—88	80%甲基对硫磷原药溶液	GB 11937—89	水源水中苯系物卫生检验标准方法
GB 9550—88	50%甲基对硫磷乳油	GB 11938—89	水源水中氯苯系化合物卫生检验标准方法
GB 9551—88	百菌清原药	GB 11939—89	水源水中二硝基苯类和硝基氯苯类卫生检验标准方法
GB 9552—88	75%百菌清可湿性粉剂	GB 11940—89	水源水中巴豆醛卫生检验标准方法
GB 9553—88	井冈霉素水剂	GB 12005.5—89	聚丙烯酰胺中残留丙烯酰胺含量测定方法
GB 9558—88	乐果原粉及晶体乐果	GB 12022—89	工业六氟化硫
GB 9559—88	林丹	GB/T 12033—89	造纸原料和纸浆中糖类组分的气相色谱法测定
GB 9560—88	异丙威原药	GB 12209.2—90	城市燃气中萘含量测定
GB 9561—88	20%异丙威乳油	GB/T 12688.1—90	工业用苯乙烯纯度的测定
GB 9562—88	速灭威原药	GB/T 12701—90	工业用乙烯、丙烯中微量甲醇的测定
GB 9563—88	25%速灭威可湿性粉剂	GB/T 12717—91	工业乙酸酯类试验方法
GB 9564—88	20%速灭威乳油	GB/T 13090—91	饲料中六六六、滴滴涕的测定方法
GB 9565—88	氯氰菊酯含量分析方法	GB 13097—91	工业环氧氯丙烷
GB 9566—88	氰菊酯含量分析方法	GB 13192—91	水质　有机磷农药的测定
GB 9675—88	海产食品中多氯联苯的测定方法	GB 13194—91	水质　硝基苯、硝基甲苯、硝基氯苯、二硝基甲苯的测定
GB 9695.24—88	肉与肉制品　胆固醇含量测定	GB/T 13595—92	烟叶中拟除虫菊酯杀虫剂残留量的测定方法
GB 10219—88	油菜籽中油的芥酸的测定	GB/T 13596—92	烟叶中有机氯杀虫剂残留量的测定方法
GB 10345.7—89	白酒中乙酸乙酯的试验方法	GB/T 13597—92	烟叶中有机磷杀虫剂残留量的测定方法
GB 10345.8—89	白酒中己酸乙酯的试验方法	GB/T 13598—92	烟叶中含氮农药残留量的测定方法
GB 10351—89	食品添加剂　按叶素含量80%的桉叶油	GB/T 13610—92	天然气组分分析
GB 10410.1—89	人工煤气组分气相色谱分析法	GB/T 13747.21—92	锆及锆合金化学分析方法真空加热气相色谱法测定氢量
GB 10410.2—89	天然气常量组分气相色谱分析法	GB/T 13904—92	水质　梯恩梯、黑索今、地恩梯的测定
GB 10410.3—89	液化石油气组分气相色谱法		
GB 10625—89	高纯氩中微量氮的测定		
GB 10659—89	邻氨基苯甲醚		
GB 11424—89	山苍子油		
GB 11425—89	肉桂油		
GB 11536—89	葵子麝香		
GB 11537—89	二甲苯麝香		
GB 11538—89	精油		
GB 11539—89	单离及合成香料		
GB 11729—89	水源水中百菌清卫生标准		
GB 11731—89	居住区大气中硝基苯卫生检验标准方法		

三、美国公职分析化学家协会公定分析方法中气相色谱试验方法题目汇编

在美国公职分析化学家协会公定分析方法中，也有许多用气相色谱法的试验方法，此附录中，按编号顺序，将1990年前发布的编号与题目名汇编如下。其中有些题目相同编号不同，可能是由于试验方法不同或试样中分析物含量不同所致。

上述公定分析方法曾多次汇编成册，并于1990年发行第十五版，我国国家进出口商品检验局曾组织AOAC编译委员会将其译成中文，由中国科学技术出版社于1991年出版第1版，读者可查阅此译著。

编号	题目名	编号	题目名
963.22	油和脂肪中的脂肪酸甲酯	973.23	调味料中的乙醇
966.19	起酥油中的甘油酯	973.26	海味品中的挥发性脂肪酸
966.22	化妆品的H_2O和乙醇	973.27	无醇饮料中的溴化植物油
967.18	奶油中的β-谷甾醇	973.28	食品中的山梨糖醇
967.29	药物中的氯代丁醇	973.39	滴滴涕农药残留物
968.03	卷烟填料中的薄荷醇	973.69	药物中丙酮和醇类
968.04	农药制剂中的七氯	974.03	农药制剂中的安果
968.09	蒸馏酒中(高碳)醇和乙酸乙酯	974.05	除草剂制剂中的硫代氨基甲酸酯
968.17	谷类中的丁基化羟基茴香醚和丁基化羟基甲苯	974.21	纸和纸板中多氯联苯
968.23	油脂中的小鸡水肿因素(二噁英)	974.30	饲料预混剂中甲萘醌亚硫酸氢钠(水溶性维生素K_3)
968.47	药品中的吩噻嗪	974.45	动物组织中二氯二甲吡啶酚的残留量
969.22	香草提取物中的有机酸	975.06	酒精制品中的变性剂(易挥发的)
969.29	调味含油树脂中的二氯化乙烯和三氯乙烯	975.24	柠檬、柑桔与酸橙提取物中的乙醇
969.40	药物中的维生素E	975.40	N-氨基甲酸酯杀虫剂残留物
969.56	饲料中的皮蝇磷	976.12	葡萄酒中的香豆素
970.05	农药制剂中的敌草索	976.23	硫丹、硫丹硫酸酯、三氯杀螨砜和杀螨剂亮药残留量
970.31	蛋品中的β-羟基丁酸、乳酸和琥珀酸	976.26	多组分食品中的胆固醇
970.50	乳脂中的(植物性)脂肪	976.35	药物中的尼可刹米
970.51	植物油脂中的(动物)脂肪(胆甾醇)的测定	976.36	动物组织中醋酸甲烯雌醇的残留量
970.61	化妆品中的丙二醇	977.04	农药制剂中的甲苯对硫磷
970.81	药品中的乙氯戊烯炔醇	977.07	农药制剂中的伏草隆
971.02	盒装卷烟的混合填料和磨碎烟草中的甘油、丙亚丙基二醇和三甘醇	977.17	加热植物油中的聚合物和氧化物
971.03	有害物质中的甲醇	977.18	谷物中挥发性熏蒸剂
971.05	农药制剂中的克菌丹	977.19	多脂产品中六氯苯和灭蚊灵农药残留物
971.08	农药制剂中的均三嗪	977.34	药物粉末中的甲拿酮
971.11	鸡蛋中的挥发性脂肪酸	978.06	农药制剂中的对硫磷
971.12	香草提取物中的非香草醛的香草挥发物	978.16	亚乙基硫脲农药残留物
971.18	果汁中的碳水化合物	978.29	药物粉末中的盐酸可卡因
972.10	蒸馏酒中的(高碳)醇和乙酸乙酯	979.01	Cambridge过滤垫上的尼古丁
972.11	蒸馏酒中的甲醇	979.03	农药制剂中的敌草腈
972.18	香料提取物中的甘草酸胺	979.05	农药制剂中的马拉硫磷
972.47	药物中的苯丙胺	979.27	药物粉末中的苯环利定
972.52	药物中的三聚乙醛	980.04	农药制剂中的N-辛基二环庚烯二甲酰亚胺
973.12	农药制剂中右旋反式丙烯菊酯的测定	980.10	农药制剂中的乙拌磷
971.14	农药制剂中的氧草胺式氟乐果	980.11	微囊农药制剂中的甲基对硫磷或乙基对硫磷
973.17	AG氯丹中的七氯		

续表

编号	题　目　名	编号	题　目　名
980.12	农药制剂中的乙丙硫磷	985.06	农药制剂中的丙草胺
980.22	脂肪组织中六氯苯和全氯五环癸烷农药残留物	985.07	农药制剂中的杀螟硫磷
980.36	饲料添加物中乙酸甲烯雌醇	985.13	食品中的丙烯腈
981.02	工业级三氯杀螨砜及其农药制剂	985.20	油和脂肪中的芥酸
981.04	农药制剂中的特丁津	985.21	人造奶油中总的反式脂肪酸异构体
982.02	农药制剂中的除虫菊酯和胡椒基丁醚	985.22	有机氯、有机磷农药残留量
982.06	微囊农药制剂中的二嗪磷	985.24	明胶中五氯酚
982.08	农药制剂中的灭定威	985.41	低酸罐头食品中产芽孢菌
982.11	啤酒中 *N*-亚硝基二甲胺	986.01	婴儿乳胶奶头中 *N* 亚硝基二丁胺
982.12	啤酒中 *N* 亚硝基二甲胺	986.02	农药制剂中的氯氰菊酯
982.20	小虾中的吲哚	986.03	农药制剂中的氯菊酯
982.40	猪组织中磺胺二甲基嘧啶的残留量	986.04	农药制剂中的丁草胺
982.41	猪组织中磺胺二甲基嘧啶的残留量	986.05	农药制剂中的毒草胺
983.08	农药制剂中的硫丹	986.07	农药制剂中的丰索磷
983.13	葡萄酒中的乙醇	986.12	鲑鱼罐头中的乙醇
983.20	鱼和贝类中的汞(甲基)	986.18	小麦里的脱氧瓜蒌镰菌醇
983.21	鱼中有机氯农药和多氯联苯残留物	986.19	油和脂肪中的甘油三酸酯
984.04	三苯锡、代森锰农药制剂中的三苯锡	986.20	谷类、谷类制品中三溴乙烷
984.05	工业级 BHC、农药制剂、林丹洗发剂以及洗涤剂中的 γ-BHC	987.01	工业级丙膦及其制剂
984.08	农药制剂中的氟丁草定	987.05	婴儿奶瓶橡胶奶头中的 *N* 亚硝胺
984.11	农药制剂中的赛克津	988.03	微囊农药制剂中的甲草胺
984.14	啤酒中乙醇	988.11	鱼及贝类中的汞(甲基)
985.03	农药制剂中的氯菊酯	988.14	混合生育酚浓缩剂中生育酚异构体
985.04	农药制剂中的甲草胺	989.02	工业级杀螟硫磷及其制剂
985.05	农药制剂中的杀虫脒	989.09	添加的维生素 E 浓缩剂中 α-生育酚乙酸酯

四、筛目与筛孔尺寸对照表①

GB 6003—85 筛孔基本尺寸/mm			美国 ASTM 筛			美国泰勒筛			德国 DIN 筛		
主要尺寸 R20/3	补充尺寸		旧筛制		现行筛制，ASTM E11—95	旧筛制		现行筛制	旧筛制		现行筛制，DIN4188-81
	R20	R40/3	筛号	筛孔尺寸/mm	筛孔尺寸/mm	目	筛孔尺寸/mm	筛孔尺寸/mm	筛号	筛孔尺寸/mm	筛孔尺寸/mm
	0.020										0.020
	0.022	0.022									0.022
	0.025	0.026									0.025
	0.028		500	0.029							0.028
	0.032	0.032	450	0.033							0.032
	0.036	0.038	400	0.037	0.038	400	0.037	0.038			0.036
	0.040										0.040
0.045	0.045	0.045	325	0.044	0.045	325	0.044	0.045			0.045
	0.050	0.053	270	0.053	0.053	270	0.053	0.053			0.050
	0.056										0.056
0.063	0.063	0.063	230	0.063	0.063	250	0.063	0.063	100	0.061	0.063
	0.071	0.075	200	0.074	0.075	200	0.074	0.075	80	0.0762	0.071
	0.080										0.080
0.090	0.090	0.090	170	0.088	0.090	170	0.089	0.090	70	0.0889	0.090

续表

GB 6003—85 筛孔基本尺寸/mm			美国 ASTM 筛			美国泰勒筛			德国 DIN 筛		
主要尺寸 R20/3	补充尺寸		旧筛制		现行筛制，ASTM E11-95	旧筛制		现行筛制	旧筛制		现行筛制，DIN4188—81
	R20	R40/3	筛号	筛孔尺寸/mm	筛孔尺寸/mm	目	筛孔尺寸/mm	筛孔尺寸/mm	筛号	筛孔尺寸/mm	筛孔尺寸/mm
	0.100	0.106	140	0.105	0.106	150	0.104	0.106	60	0.102	0.100
	0.112										0.112
0.125	0.125	0.125	120	0.125	0.125	115	0.124	0.125	50	0.120	0.125
	0.140	0.150	100	0.150	0.150	100	0.147	0.150	40	0.150	0.140
	0.160										0.160
0.180	0.180	0.180	80	0.180	0.180	80	0.175	0.180			0.180
	0.200	0.212	70	0.21	0.212	65	0.208	0.212	30	0.200	0.200
	0.224										0.224
0.250	0.250	0.250	60	0.250	0.250	60	0.246	0.250	24	0.250	0.250
	0.280	0.300	50	0.300	0.300	48	0.295	0.300	20	0.300	0.280
	0.315										0.315
0.355	0.355	0.355	45	0.355	0.355	42	0.351	0.355	16	0.385	0.355
	0.400	0.425	40	0.420	0.425	35	0.417	0.425			0.400
	0.450								14	0.430	0.450
0.500	0.500	0.500	35	0.500	0.500	32	0.495	0.500	12	0.490	0.500
	0.560	0.600	30	0.600	0.600	28	0.589	0.600	10	0.600	0.560
	0.630										0.630
0.710	0.710	0.710	25	0.710	0.710	24	0.701	0.710	8	0.75	0.710
	0.800	0.850	20	0.840	0.850	20	0.833	0.850			0.800
	0.900										0.900
1.00	1.00	1.40	18	1.00	1.00	16	0.991	1.00	6	1.02	1.00
	1.12	1.18	16	1.19	1.18	14	1.168	1.18			1.12
	1.25								5	1.02	1.25
1.40	1.40	1.40	14	1.40	1.40	12	1.397	1.40			1.40
	1.60	1.70	12	1.68	1.70	10	1.651	1.70			1.60
	1.80										1.80
2.00	2.00	2.00	10	2.00	2.00	9	1.981	2.00			2.00
	2.24	2.36	8	2.38	2.36	8	2.362	2.36			2.24
	2.50										2.50
2.80	2.80	2.80	7	2.80	2.80	7	2.794	2.80			2.80
	3.15	3.35	6	3.36	3.35	6	3.327	3.35			3.15
	3.55										3.55
4.00	4.00	4.00	5	4.00	4.00	5	3.962	4.00			4.00
	4.50	4.75	4	4.76	4.75	4	4.699	4.75			4.50
	5.00										5.00
5.60	5.60	5.60	$3\frac{1}{2}$	5.60	5.60	$3\frac{1}{2}$	5.613	5.60			5.60
	6.30	6.70	0.265 (in)	6.35	(6.30)	3	6.68	6.70			6.30
	7.10										7.10
8.00	8.00	8.00	5/16 (in)	8.00	8.00	$2\frac{1}{2}$	7.925	8.00			8.00
	9.00	9.50	3/8 (in)	9.51	9.50			9.50			9.00
	10.0										10.0
11.2	11.2	11.2	7/16 (in)		11.2			11.2			11.2

续表

GB 6003—85 筛孔基本尺寸/mm			美国ASTM筛			美国泰勒筛			德国DIN筛		
主要尺寸 R20/3	补充尺寸		旧筛制		现行筛制，ASTM E11—95	旧筛制		现行筛制	旧筛制		现行筛制，DIN4188 81
	R20	R40/3	筛号	筛孔尺寸/mm	筛孔尺寸/mm	目	筛孔尺寸/mm	筛孔尺寸/mm	筛号	筛孔尺寸/mm	筛孔尺寸/mm
	12.5	13.2	0.530 (in)	12.70	(12.50)			13.2			12.5
	14.0				13.2						14.0
16.0	16.0	16.0	5/8 (in)	16.0	16.0			16.0			16.0
	18.0	19.0	3/4 (in)					19.0			18.0
	20.0			19.0	19.0						20.0
22.4	22.4	22.4	7/8 (in)		22.4			22.4			22.4
	25.0	26.5	1.06 (in)	25.4	(25.0)						25.0
	28.0				26.5			26.5			28.0
31.5	31.5	31.5	$1\frac{1}{4}$ (in)		31.5						31.5
	35.5	37.5	$1\frac{1}{2}$ (in)		37.5						35.5
	40.0										40.0
45.0	45.0	45.0	$1\frac{3}{4}$ (in)		45.0						45.0
	50.0	53.0	2.12 (in)		(50.0)						50.0
	56.0				53.0						56.0
63.0	63.0	63.0	$2\frac{1}{2}$ (in)		63.0						63.0
	71.0	75.0	3 (in)		75.0						71.0
	80.0										80.0
90.0	90.0	90.0	$3\frac{1}{2}$ (in)		90.0						90.0
	100	106	4.24 (in)		(100)						100
	112				106						112
125	125	125	5 (in)		125						125

① 过去我国较多采用美国泰勒公司(Tyler)的标准筛，以目数来分级。

索　引

一、气相色谱术语索引

（按汉语拼音字母顺序排列）

A

B

C

D

F

G

H

J

K

L

M

N

P

Q

R

S

T

V

W

X

Y

Z

二、气相色谱术语英文索引

A

B

C

D

E

F

G

H

I

L

M

N

O

P

R

S

T

V

W

三、固定液类别索引

四、固定液名称索引

为了查索表5-25至表5-46中所列的固定液，依其英文名称、商品名称编了此固定液名称索引。

固定液名称的排序按照以下规则：

1 按固定液名称的英文字母顺序排列。

2 名称中的键异构体形容词，如 *n*-、*iso*-、*neo*-等不计入顺序。

3 名称中的位置异构体形容词，如 *m*-、*o*-、*p*-等不计入顺序。

4 名称中表示位置的数字、希腊文字母等不计入顺序。

五、计算机程序索引

六、谱图索引

图号　　图　名

图号 图名

图号 图名

内 容 提 要

第二版《分析化学手册》在第一版的基础上做了较大幅度的调整、增删和补充。全套书由10个分册构成：基础知识与安全知识、化学分析、光谱分析、电分析化学、气相色谱分析、液相色谱分析、核磁共振波谱分析、热分析、质谱分析和化学计量学。

第二版《分析化学手册》中注意贯彻了国家法定计量单位制关于量和单位的基本原则。在取材上突出实用性，注重基础知识、基础数据与最新发展并容。在内容上注重科学性与准确性。在编排上强调系统性与查阅方便。

本分册由三部分（三篇）内容构成：第一部分是气相色谱方法的基础，包括原理、定义、概念、仪器、定性与定量方法等的叙述；第二部分是气相色谱定性、定量用数据选集，其中收录了国内外色谱工作者至1997年为止发表的重要定性、定量数据数千个；第三部分是色谱图选集，其中收集了典型的重要色谱分离谱图1000多张。

本书为色谱工作者提供了分析各类样品的方法途径及参考数据，内容丰富，资料翔实。可供各行业从事色谱分析工作的人员查阅参考。